

Η Κρυσταλλική Δομή

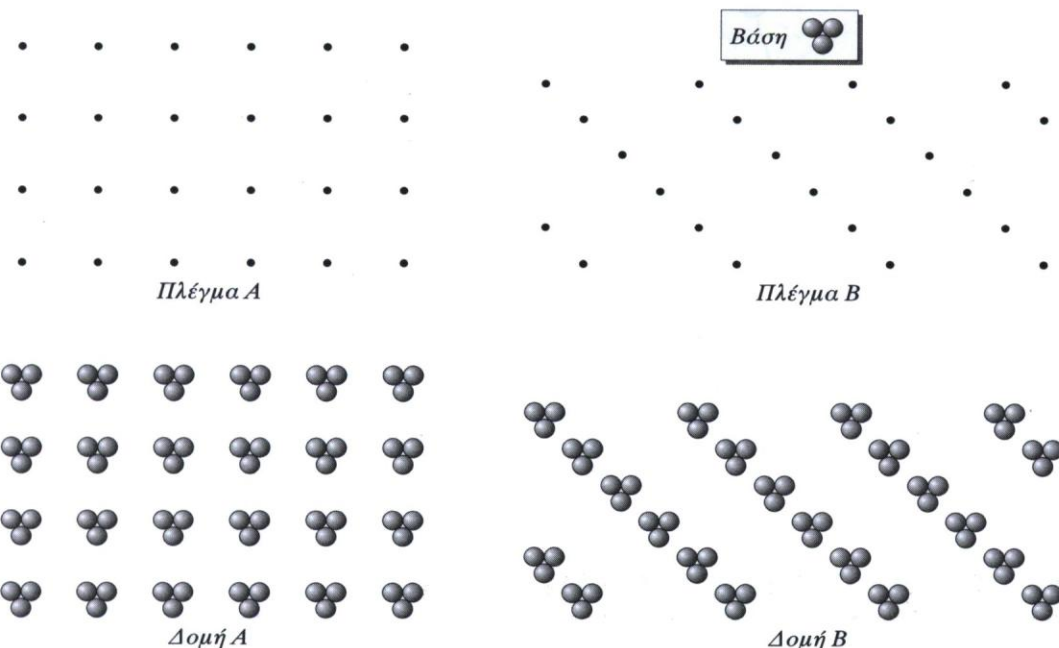
Περιοδική επανάληψη σε τρεις διαστάσεις της ίδιας δομικής μονάδας.
Οι δομικές αυτές μονάδες είναι μόρια ή ομάδες μορίων.

Πλέγμα ένα σύνολο γεωμετρικών σημείων που ορίζονται από τρία θεμελιώδη διανύσματα μετατόπισης **a**, **b**, **c** και εμφανίζουν μια κανονική περιοδική διάταξη στο χώρο ώστε:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \text{ όπου } u, v, w \text{ είναι τυχαίοι ακέραιοι.}$$

Το παραλληλεπίπεδο που ορίζεται από την κατάλληλη επιλογή των αξόνων **a**, **b**, **c** ονομάζεται **μοναδιαία κυψελίδα**. Ο κρύσταλλος μπορεί να θεωρηθεί ότι παράγεται με μετατόπιση κατά τις τρεις διαστάσεις μιας μοναδιαίας κυψελίδας.

Μία κρυσταλλική δομή σχηματίζεται με την περιοδική (παράλληλη) μετατόπιση και προς τις τρεις κατευθύνσεις του καθορισμένου χώρου, μιας δομικής μονάδας που ονομάζεται και **βάση**.



Ανάλυση Κρυσταλλικής Δομής

- i) τα διανύσματα (περίοδοι) μετατόπισης **a**, **b**, **c**
- ii) το είδος των ατόμων της βάσης
- iii) οι σχετικές συντεταγμένες x_j, y_j, z_j ($j = 1, \dots, N$)

Στόχος της δομικής ανάλυσης είναι η εύρεση της κατανομής της ατομικής ηλεκτρονικής πυκνότητας, όπως αυτή εμφανίζεται περιοδικά σε κάθε μοναδιαία κυψελίδα του κρυστάλλου, με τη χρήση των δεδομένων που προκύπτουν από τα πειράματα περίθλασης (diffraction data).

*Αυτό ουσιαστικά συνεπάγεται τον καθορισμό των **ατομικών θέσεων**.*

Εντάσεις περίθλασης: ακτίνων-x, ηλεκτρονίων ή νετρονίων

i

Μελέτη και διερεύνηση των αποτελεσμάτων της περίθλασης των ακτίνων-x στον μονοκρύσταλλο.

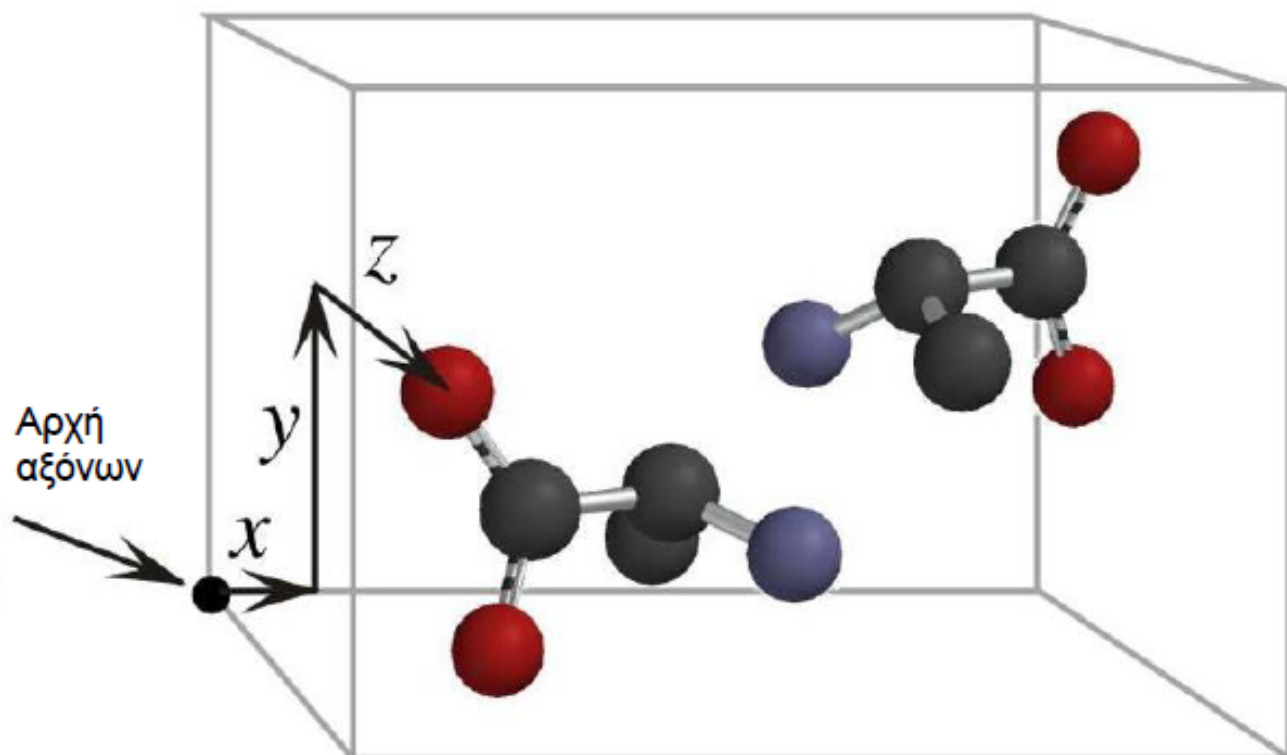
Κρυσταλλική δομή

Η κρυσταλλική δομή περιγράφεται από ένα σέτ συντεταγμένων x, y, z των ατόμων στην μοναδιαία κυψελίδα.

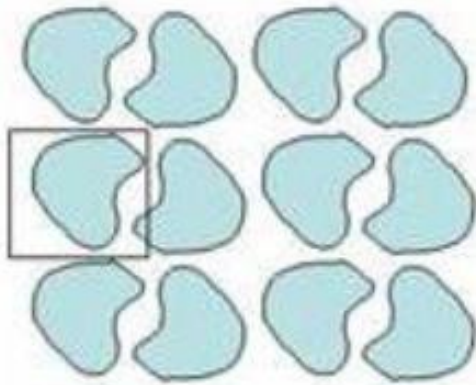
Το σύστημα συντεταγμένων συνήθως συμπίπτει με τους άξονες της μοναδιαίας κυψελίδας.

Οι συντεταγμένες είναι είτε σε Angstroms
($1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$)

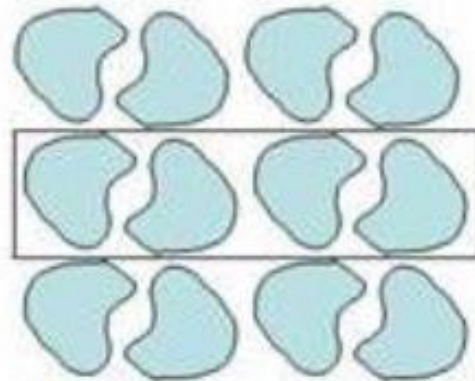
είτε είναι κλασματικές
δηλαδή $(x/a, y/b, z/c)$



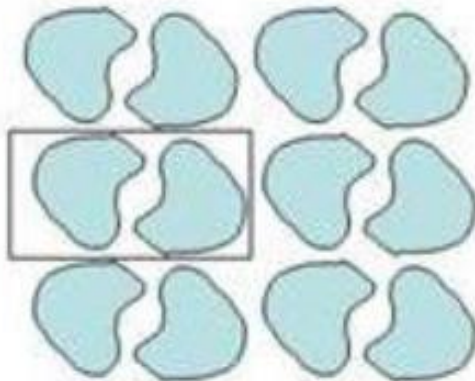
Άσκηση : Ποιο από τα παρακάτω κουτιά είναι η σωστή μοναδιαία κυψελίδα;



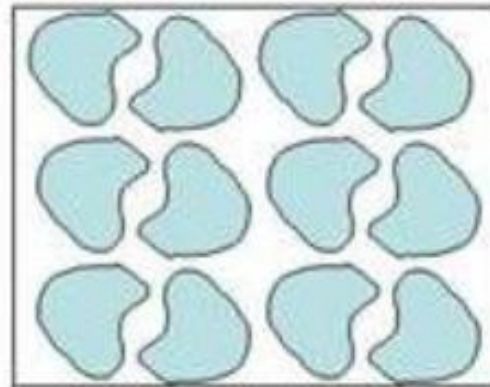
A



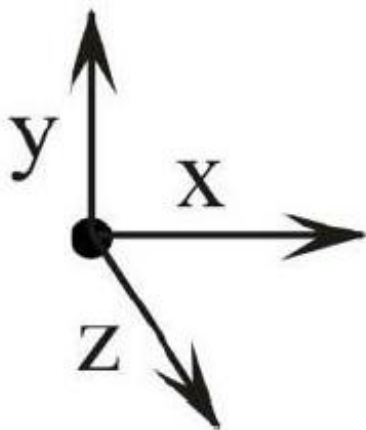
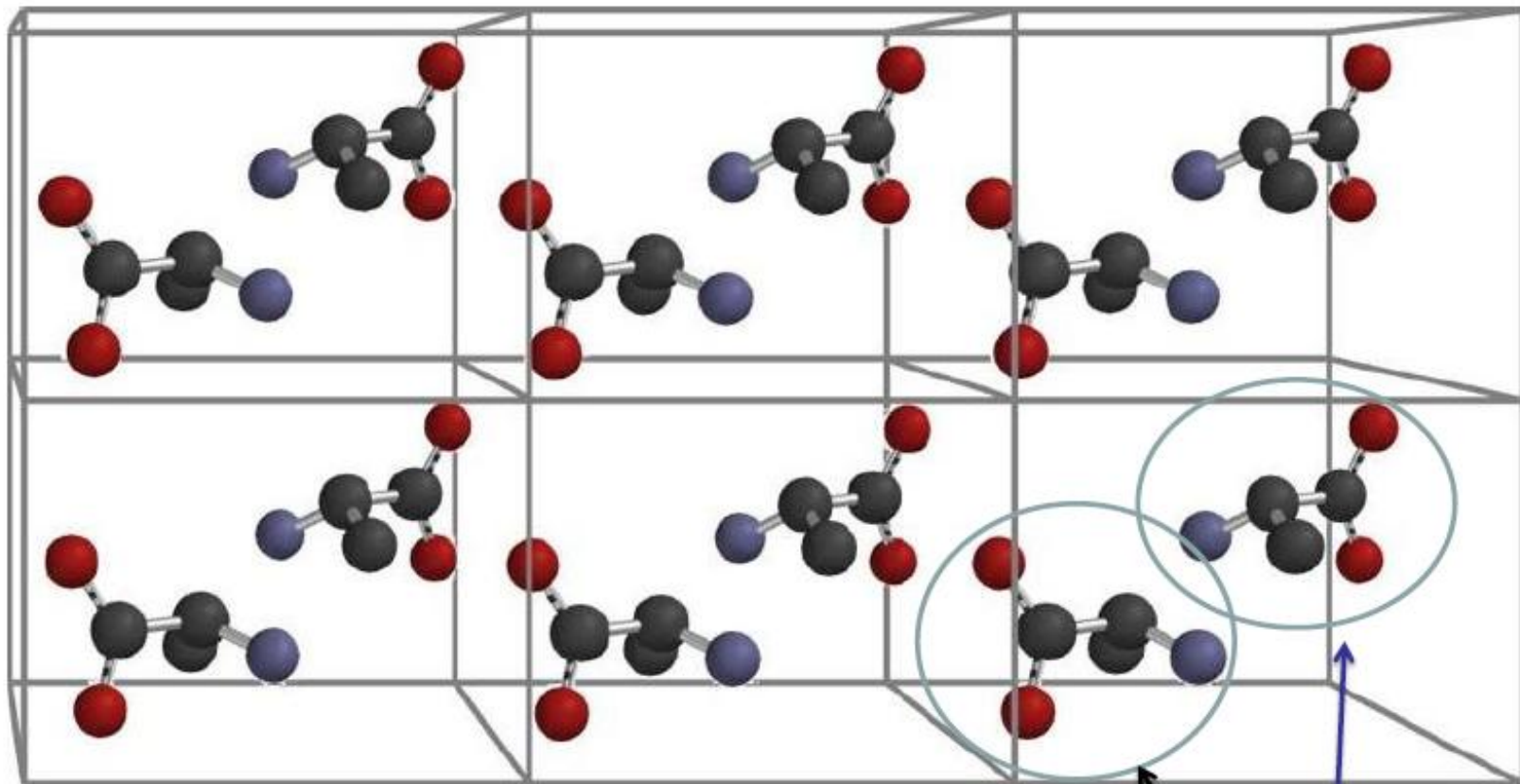
B



Γ



Δ

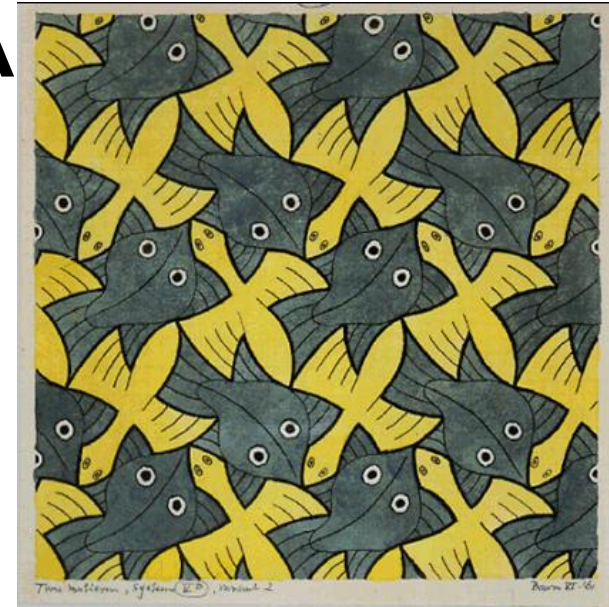


Ασύμμετρη μονάδα

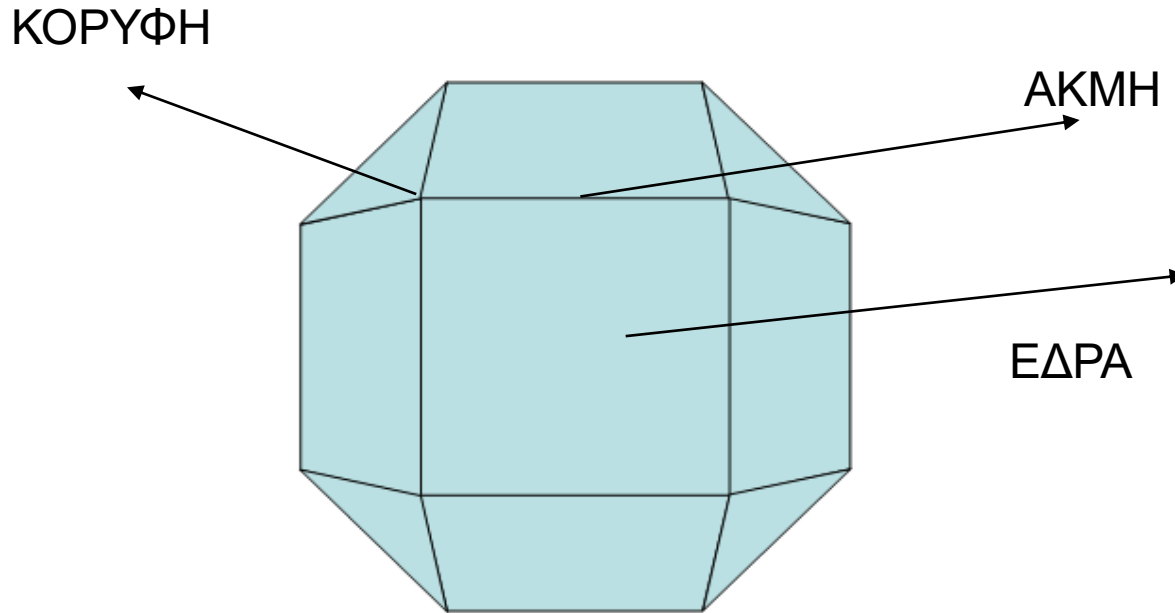
Ένα μόριο αποτελεί την ασύμμετρη μονάδα αν τα στοιχεία συμμετρίας μπορούν να παράγουν όλα τα υπόλοιπα μόρια στην μοναδιαία κυψελίδα. Αν όχι, τότε **και** τα 2 μόρια αυτά ανήκουν στην ασύμμετρη μονάδα.

Για να δούμε περισσότερα για την ορθή επιλογή και τον προσδιορισμό της μοναδιαίας κυψελίδας θα πρέπει πρώτα να πούμε λίγα πράγματα για ...

ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΚΗ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑ



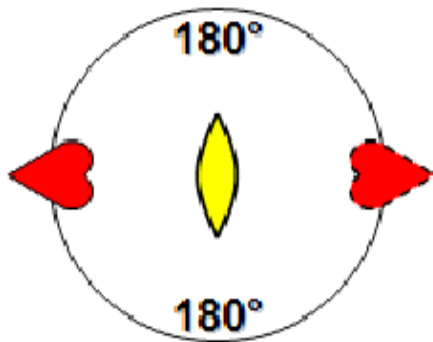
- Κάθε κρύσταλλος είναι ένα ΚΛΕΙΣΤΟ ΠΟΛΥΕΔΡΟ που ορίζεται από τα ονομαζόμενα ΠΕΡΑΤΩΤΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ που φαίνονται παρακάτω:



- Σε ένα τέλειο κρύσταλλο αυτά τα περατωτικά στοιχεία είναι δυνατόν να συνδέονται με ορισμένες ΠΡΑΞΕΙΣ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ.

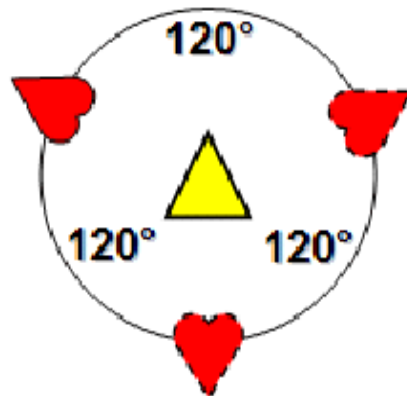
1) Άξονες Περιστροφής

- Αυτοί συμβολίζονται με n το οποίο μπορεί να πάρει τις τιμές 1, 2, 3, 4 και 6. Αν έχουμε άξονα συμμετρίας n αυτό σημαίνει ότι περιστρέφοντας κατά $360/n$ έχουμε σύμπτωση:



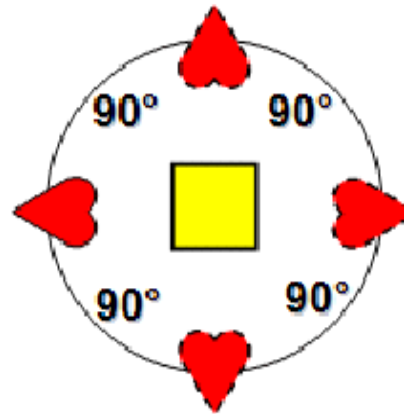
$$360/2 = 180^\circ$$

Άξονας 2



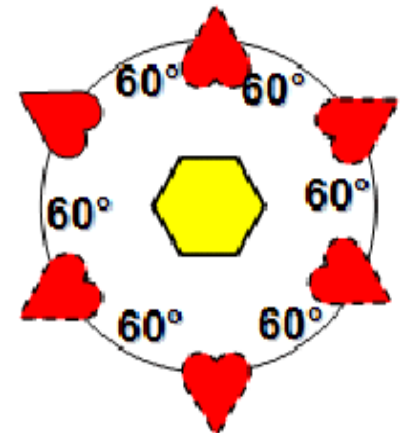
$$360/3 = 120^\circ$$

Άξονας 3



$$360/4 = 90^\circ$$

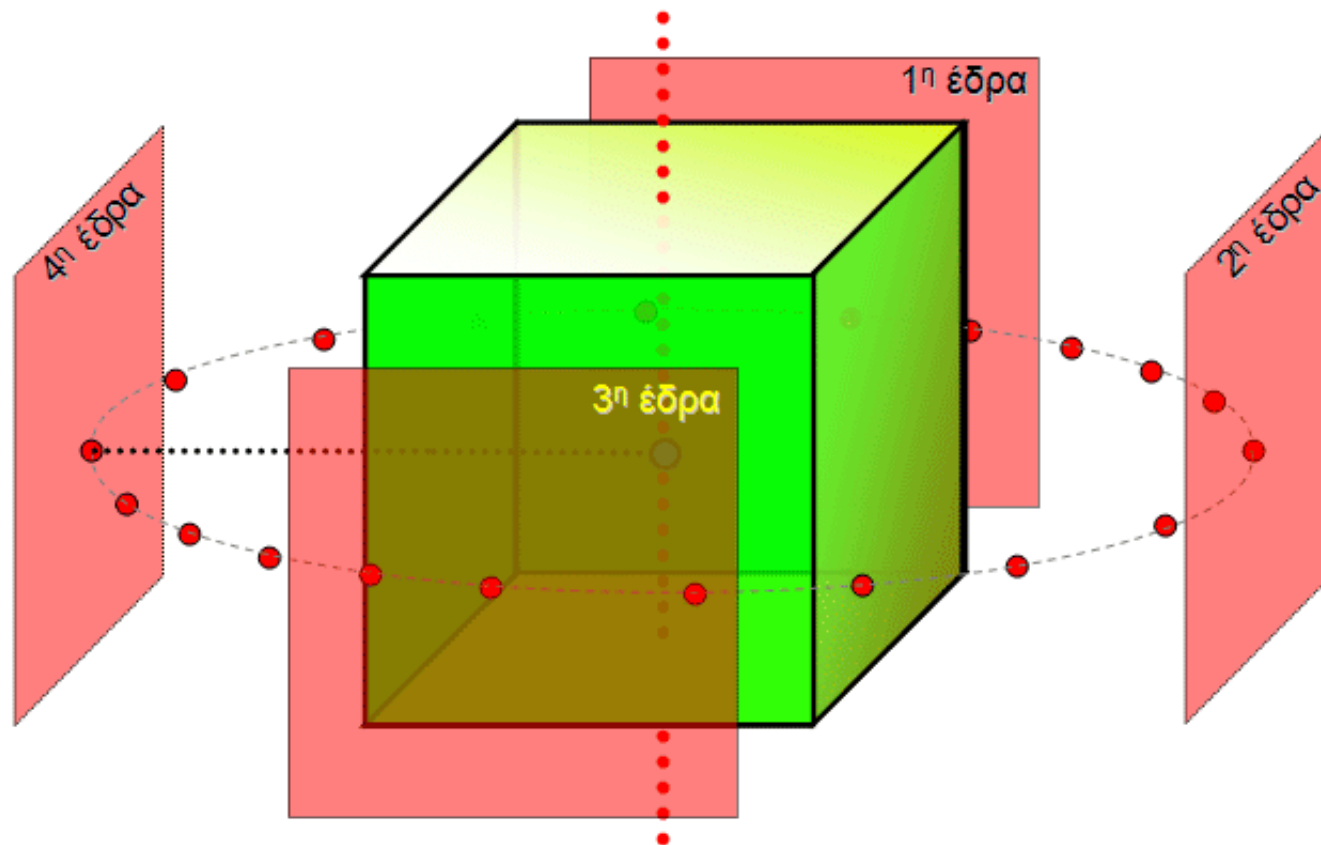
Άξονας 4



$$360/6 = 60^\circ$$

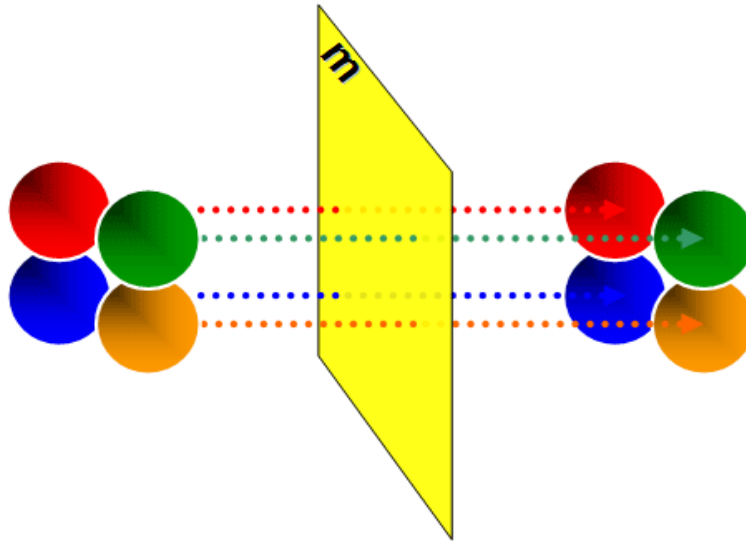
Άξονας 6

- Ένα παράδειγμα ενός κρυστάλλου με άξονα 4ης τάξης.



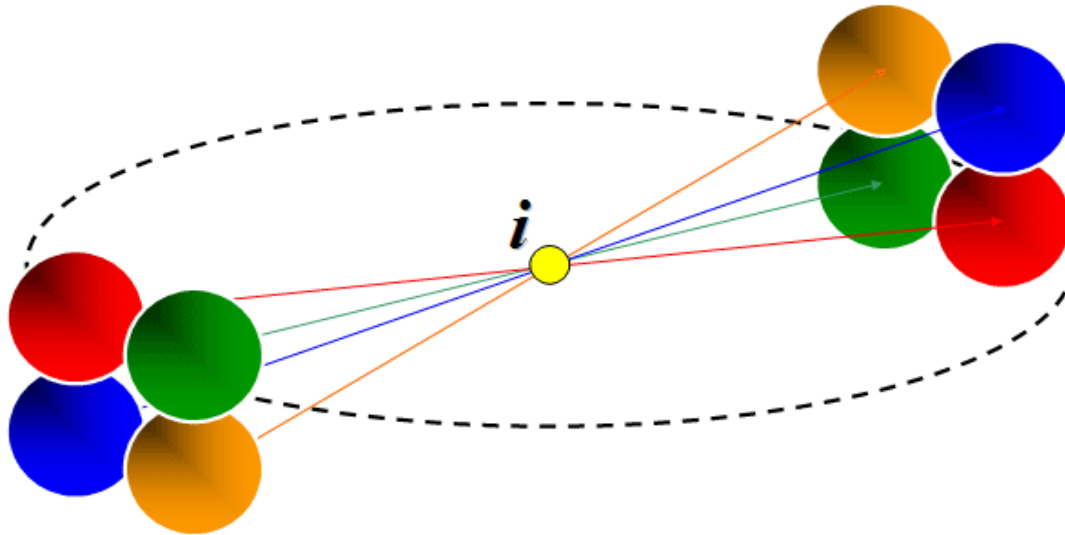
2) Επίπεδο κατοπτρισμού

- Συμβολίζεται με m . Υπάρχει όταν για κάθε περατωτικό στοιχείο υπάρχει και το είδωλό του.



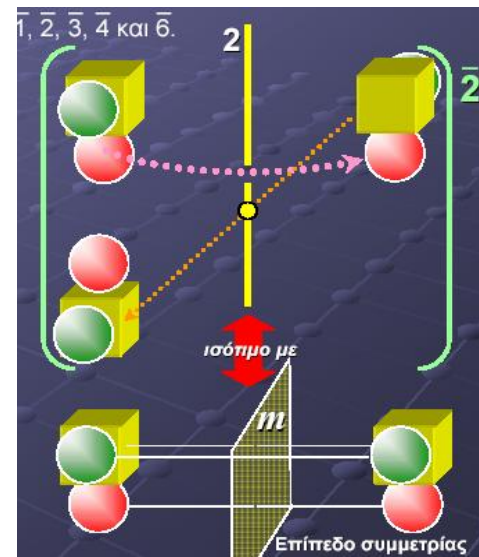
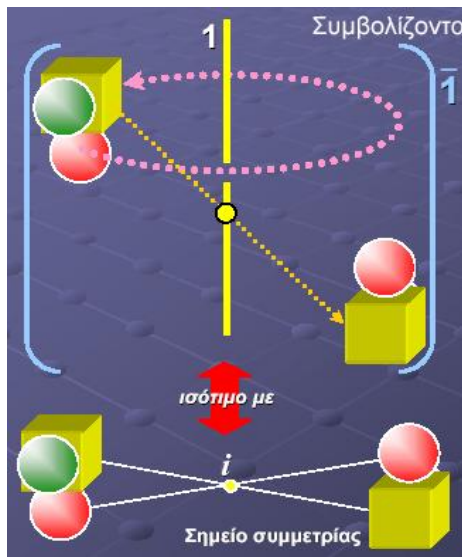
3) Κέντρο Συμμετρίας

- Είναι ένα σημείο που σε ίσες αποστάσεις από αυτό συναντούμε τα ίδια περατωτικά στοιχεία.



4) Άξονες Στροφοαναστροφής

- Είναι συνδυασμός ενός άξονα περιστροφής και της κέντρου συμμετρίας. Συμβολίζονται με \bar{n} και υπάρχουν οι $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ και $\bar{6}$.



- Συνοπτικά τώρα τα περατωτικά στοιχεία ενός κρυστάλλου μπορεί να συμμορφώνονται :

A) με άξονα περιστροφής τάξης 1, 2, 3, 4 και 6. (5 περιπτώσεις)

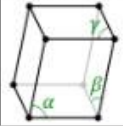
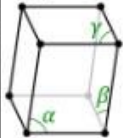
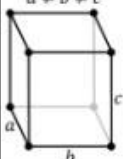
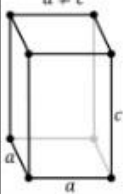
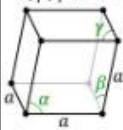
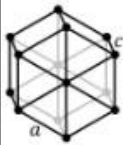
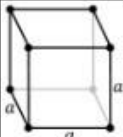
B) με άξονα στροφοαναστροφής τάξης $\underline{1} = \kappa.σ.$ $\underline{2} = m$, $\underline{3}$, $\underline{4}$, $\underline{6}$. (5 περιπτώσεις)

Γ) με κάποιο συνδυασμό των παραπάνω στοιχείων συμμετρίας. (22 συνδυασμοί)

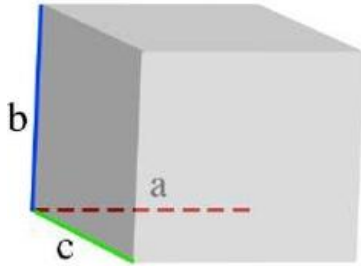
**Συνολικά 32
περιπτώσεις**

- Για να περιγράψουμε τώρα την εξωτερική συμμετρία ενός κρυστάλλου:
 - 1) Θα πρέπει να επιλέξουμε ένα «βολικό» σύστημα αξόνων που διαισθητικά καταλαβαίνουμε ότι θα πρέπει να συνδέεται με ορισμένες χαρακτηριστικές διευθύνσεις του κρυστάλλου (κρυσταλλογραφικοί άξονες).
 - 2) Θα επιλέξουμε μια έδρα ως έδρα αναφοράς και θα περιγράψουμε όλες τις υπόλοιπες ως προς αυτή.

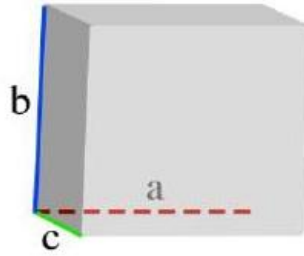
- Μπορεί να αποδειχθεί ότι αρκούν επτά διαφορετικά συστήματα αξόνων (ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ) για να περιγράψουμε ΟΛΟΥΣ τους δυνατούς κρυστάλλους.

The 7 Crystal systems	
triclinic (parallelepiped)	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 
monoclinic (right prism with parallelogram base; here seen from above)	simple $\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 
orthorhombic (cuboid)	simple $a \neq b \neq c$ 
tetragonal (square cuboid)	simple $a \neq c$ 
rhombohedral or trigonal (trigonal trapezohedron)	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 
hexagonal (centered regular hexagon)	$a \neq c$ 
cubic (isometric; cube)	simple 

Cubic
 $a=b=c$,
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



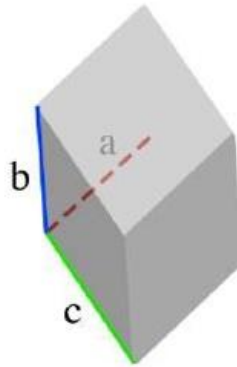
Tetragonal
 $a=b \neq c$,
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



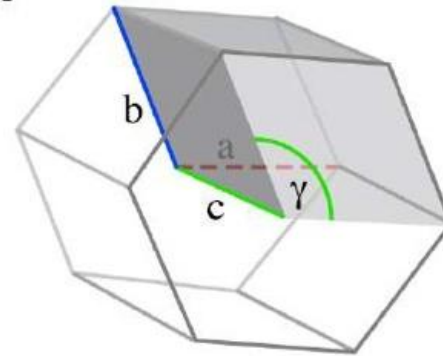
Orthorhombic
 $a \neq b \neq c$,
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



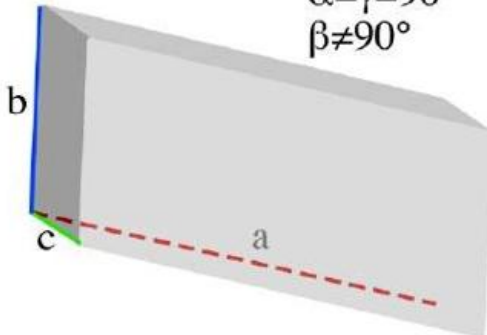
Rhombohedral
 $a=b=c$,
 $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$



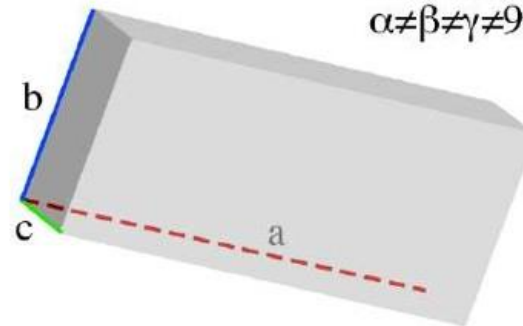
Hexagonal
 $a=b \neq c$,
 $\alpha=\beta=90^\circ$,
 $\gamma=120^\circ$



Monoclinic
 $a \neq b \neq c$,
 $\alpha=\gamma=90^\circ$,
 $\beta \neq 90^\circ$

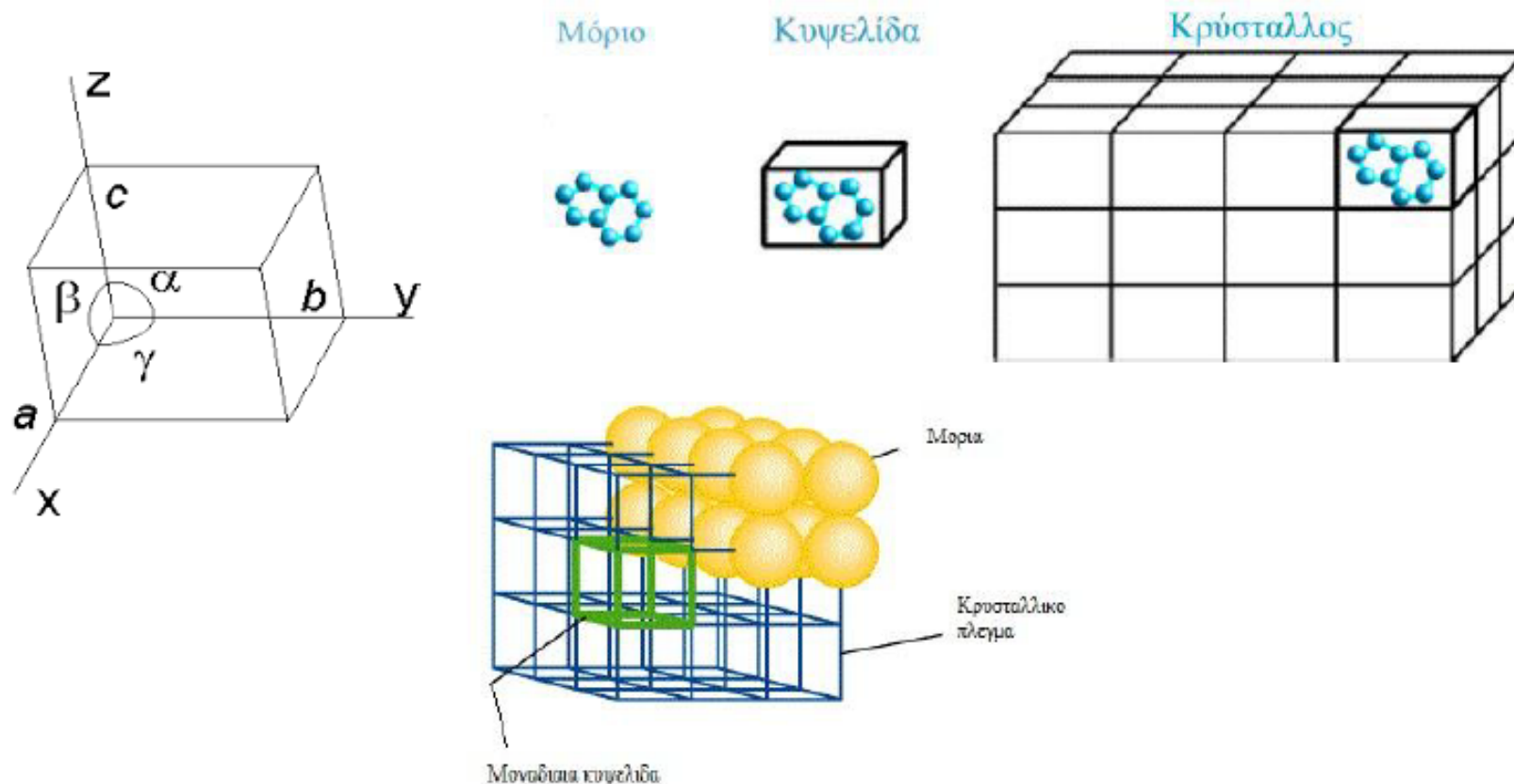


Triclinic
 $a \neq b \neq c$,
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



Το κρυσταλλικό πλέγμα και η μοναδιαία κυψελίδα

Ένας κρύσταλλος αποτελείται από όμοιες κυψελίδες που έχουν τον ίδιο προσανατολισμό και επαναλαμβάνονται στις τρεις διαστάσεις, ώστε να δημιουργούν ένα κανονικό τρισδιάστατο πλέγμα. Η μονάδα όγκου του πλέγματος με πλευρές a , b , c ονομάζεται **μοναδιαία κυψελίδα**, μπορεί να επιλεγεί με διάφορους τρόπους και περιορίζεται να έχει σχήματα τα οποία επαναλαμβανόμενα με μετατόπιση να μην αφήνουν κενά. Στην απλούστερη περίπτωση η στοιχειώδης κυψελίδα περιέχει ένα μόνο μόριο, **συνήθως όμως αποτελείται από δύο ή περισσότερα μόρια** συνδεδεμένα με κάποιο είδος συμμετρικής διευθέτησης, έτσι ώστε να συμπληρώνουν τον χώρο πιο ικανοποιητικά παρά αν ήταν το καθένα μόνο του.



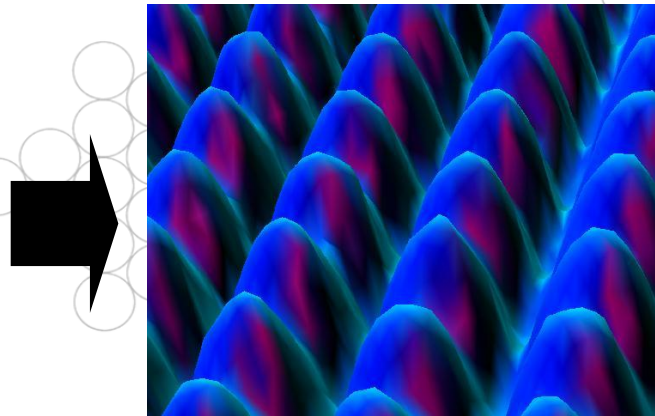
ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ

Τι είναι το κρυσταλλικό (χωρικό) πλέγμα;

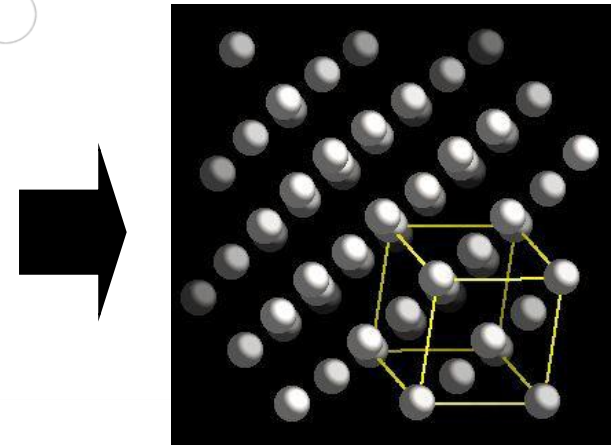
Στην κρυσταλλογραφία μελετάμε τις γεωμετρικές ιδιότητες του κρυστάλλου, γι' αυτό κάθε άτομο αναπαρίσταται με ένα γεωμετρικό σημείο που βρίσκεται στη θέση ισορροπίας αυτού του ατόμου



Platinum



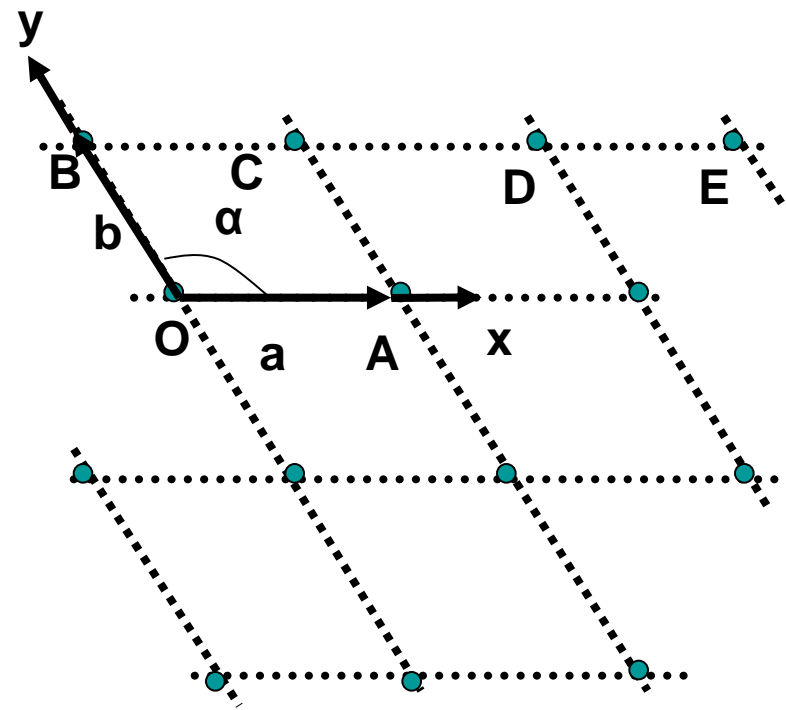
Platinum surface
(scanning tunneling microscope)



Crystal lattice and structure of Platinum

Κρυσταλλικό πλέγμα

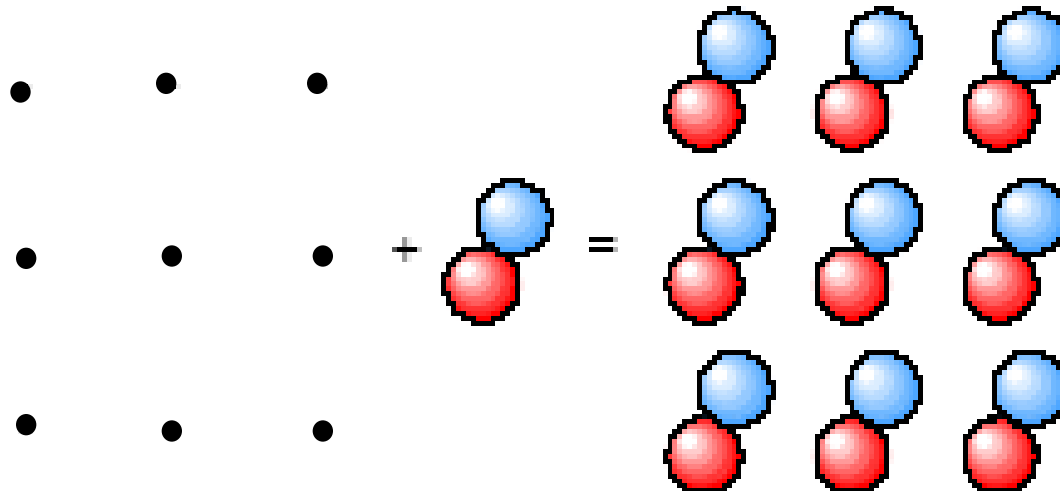
- Διάταξη σημείων χώρου που εκτείνεται στο άπειρο,
- Τα περιβάλλοντα σημεία είναι τα ίδια για κάθε σημείο του πλέγματος
- Η διάταξη επαναλαμβάνεται περιοδικά σε όλο τον κρύσταλλο



Κρυσταλλική δομή = Κρυσταλλικό πλέγμα + Βάση

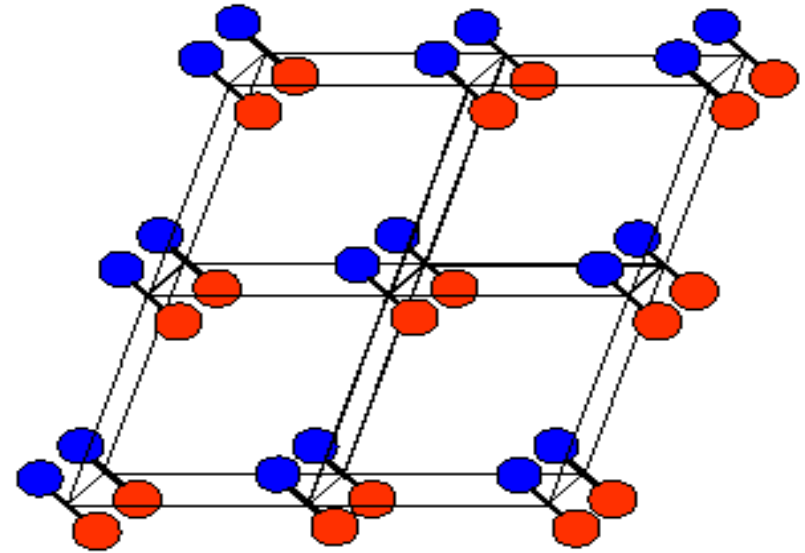
- Η κρυσταλλική δομή προκύπτει από την προσαρμογή ατόμων, ομάδων ατόμων ή μορίων που ονομάζονται βάση (μοτίβο) στο κρυσταλλικό πλέγμα.

Κρυσταλλική δομή = Κρυσταλλικό πλέγμα • + Βάση 



Κρυσταλλική δομή

- Μην συγχέεται τα άτομα με τα σημεία του κρυσταλλικού πλέγματος
- τα σημεία του κρυσταλλικού πλέγματος είναι γεωμετρικά σημεία
- Τα σημεία του κρυσταλλικού πλέγματος δεν βρίσκονται υποχρεωτικά σε κέντρα ατόμων

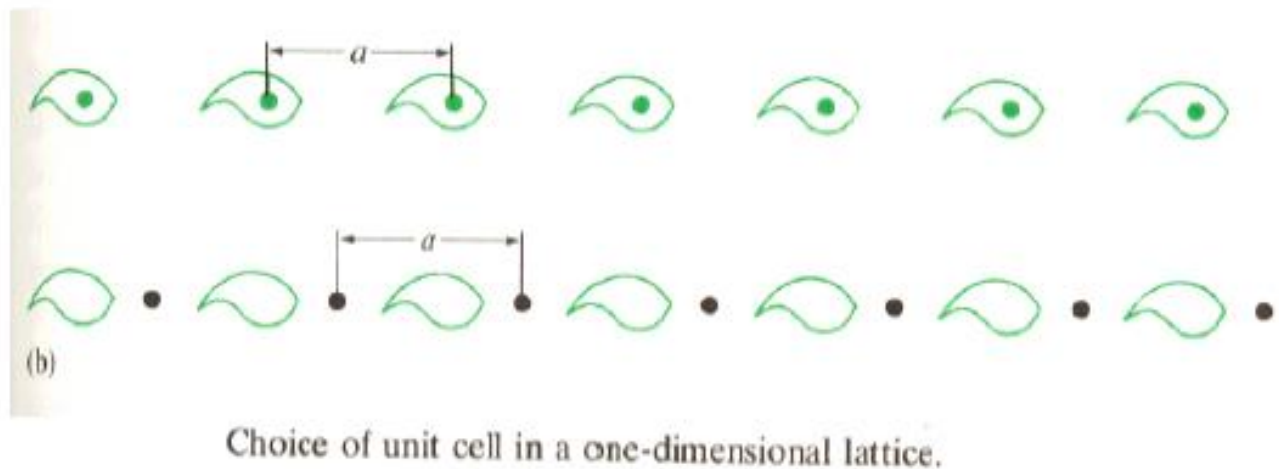
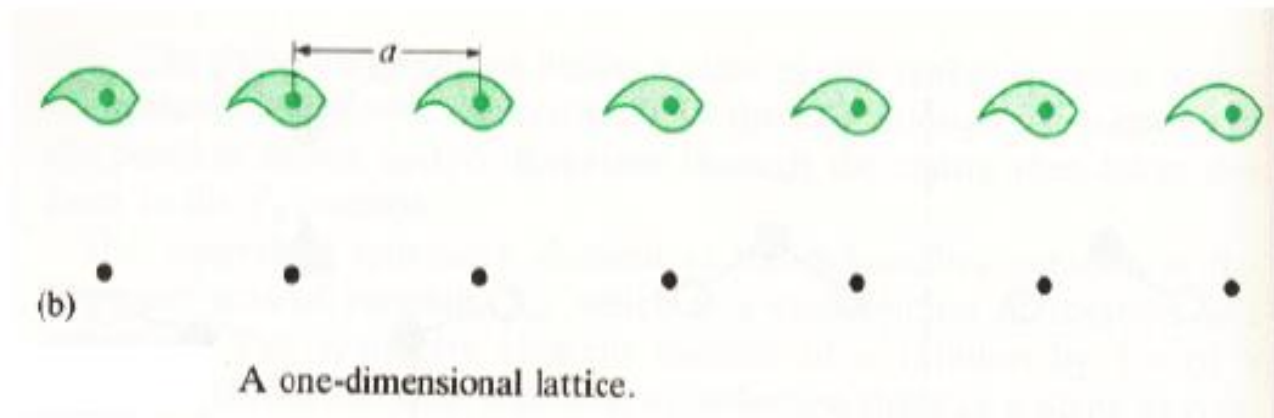


Κρυσταλλική δομή = Κρυσταλλικό πλέγμα • + Βάση 

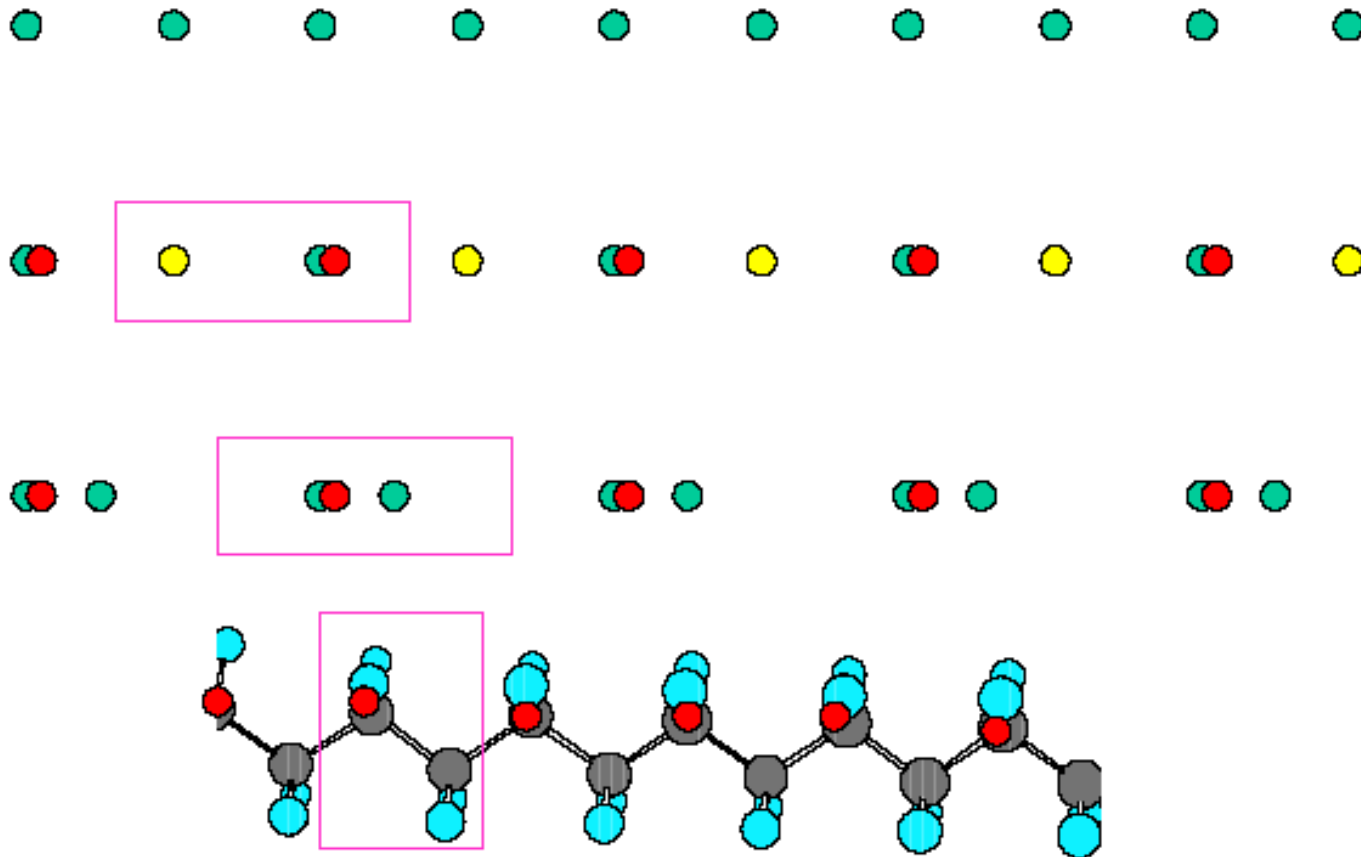
Μοναδιαία κυψελίδα σε 1-διάσταση

a. The lattice and its unit in 1D:

$$T = m\underline{a} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

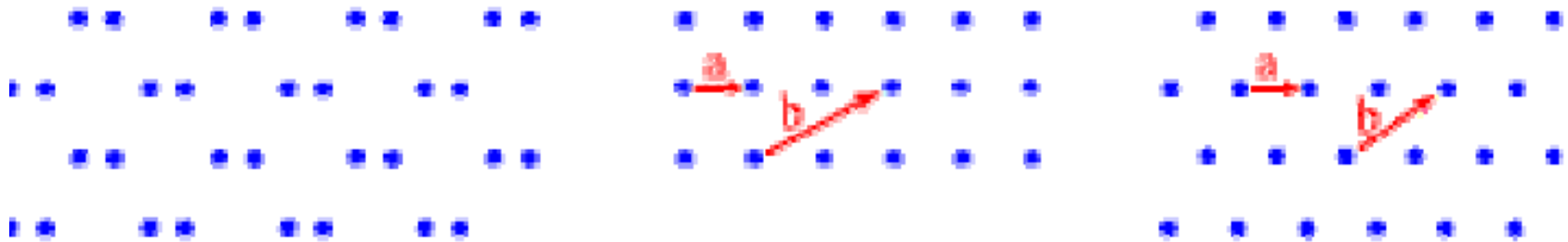


Μοναδιαία κυψελίδα σε 1-διάσταση



One dimensional lattice

Κρυσταλλικό πλέγμα σε 2-διάστασις



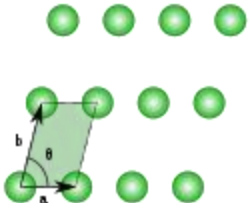
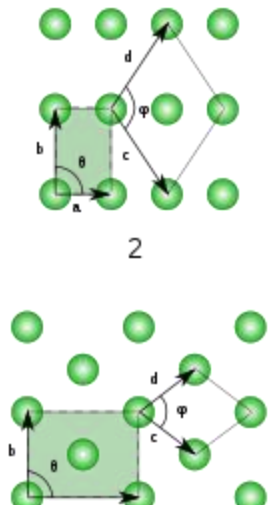
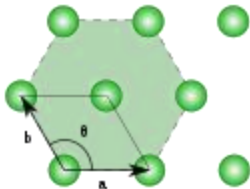
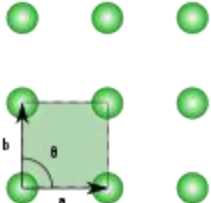
Lattice:

- A periodic pattern of points in space, such that each lattice point has identical surroundings.
- Can be reproduced by translational motion along the vector between any two points.

$$T = m\underline{a} + n\underline{b} \quad (m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Μοναδιαά κυψελίδα σε 2-διάστασις

Πλέγμα Bravais

 <p>1</p>	 <p>2 3</p>	 <p>4</p>	 <p>5</p>
$ a \neq b , \theta \neq 90^\circ$ m	$ a \neq b , \theta = 90^\circ$ $ c = d , \phi \neq 90^\circ$ o	$ a = b , \theta = 120^\circ$ h	$ a = b , \theta = 90^\circ$ t

Στις 2-διαστάσεις υπάρχουν 5 πλέγματα Bravais που ανήκουν σε 4 κρυσταλλικές οικογένειες.

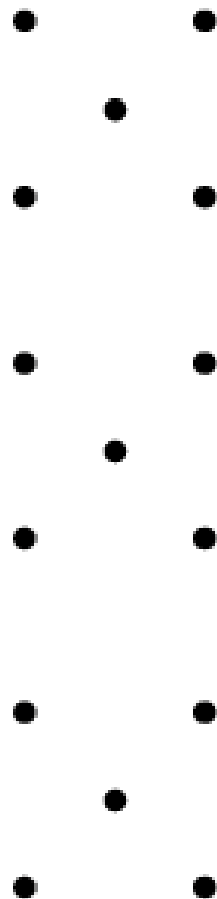
m – oblique,
o – rectangular and centered rectangular,
h – hexagonal, and
t – tetragonal

Δισδιάστατο πλέγμα Bravais με διαφορετικές βάσεις

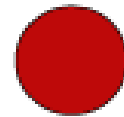
Bravais
lattice

basis

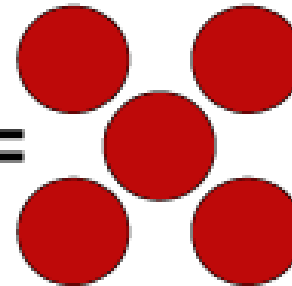
crystal



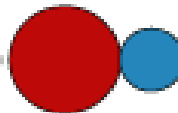
+



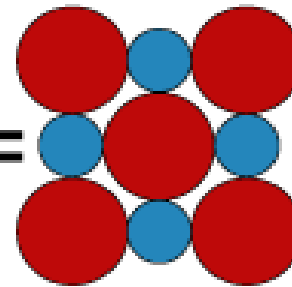
=



+



=



+



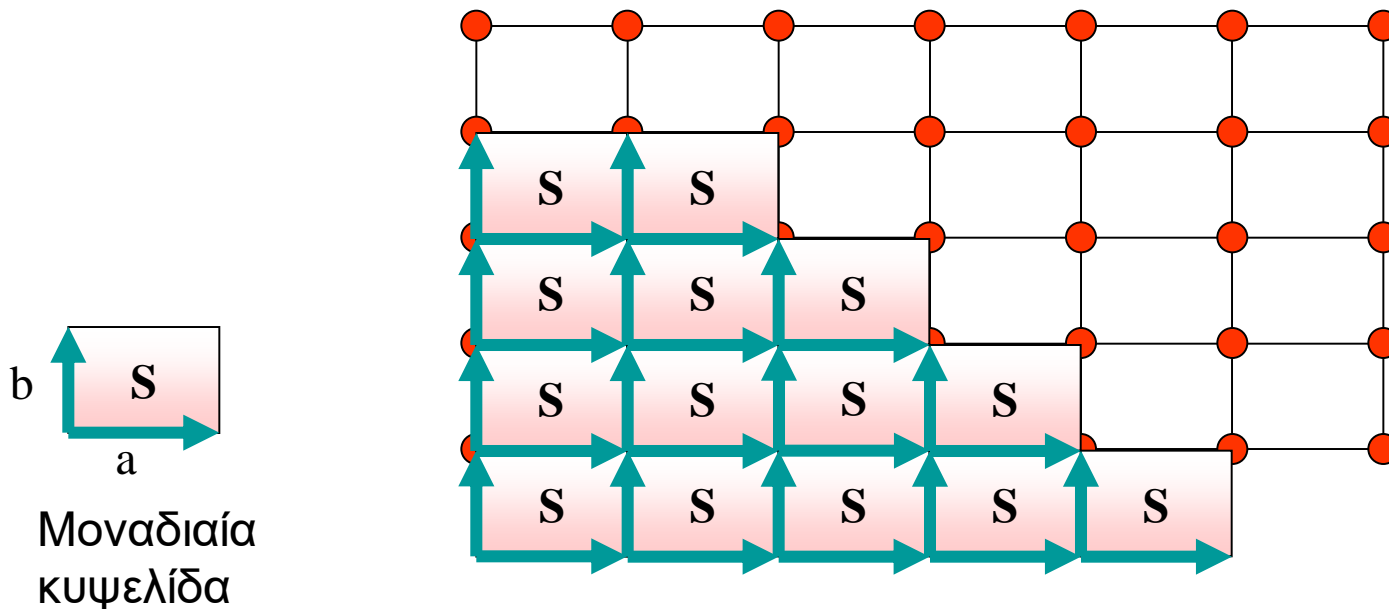
=



Μοναδιαία κυψελίδα σε 2D

- Το μικρότερο κομμάτι του κρυστάλλου (ομάδα ατόμων, ιόντων ή μορίων), το οποίο αποτελεί το δομικό λίθο που καθαρά με μεταφορική επανάληψη του σχηματίζει όλον τον κρύσταλλο

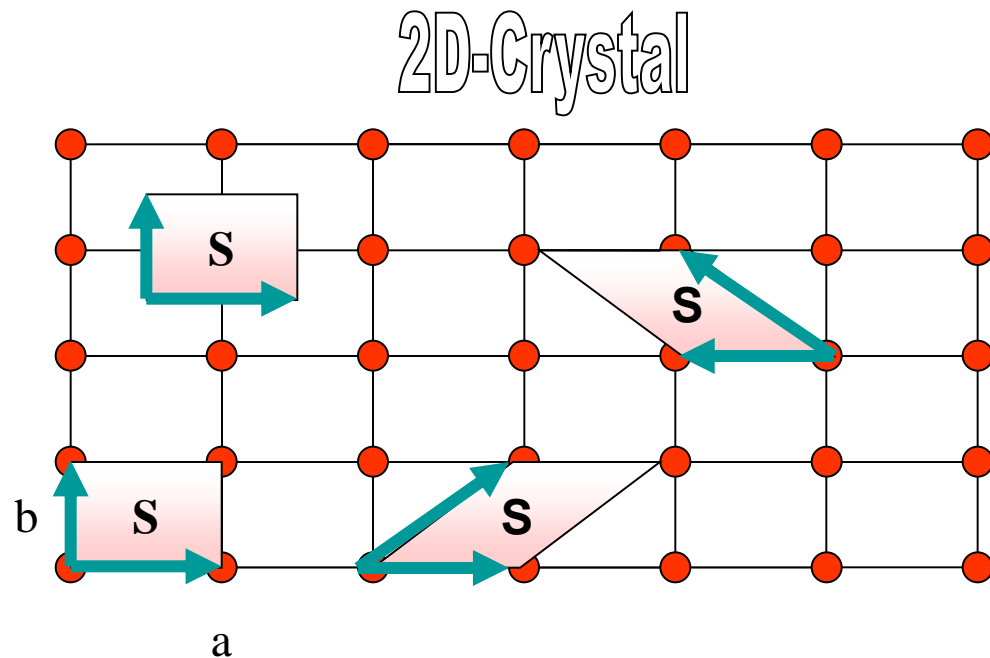
2D-Crystal



$$T = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} \quad (m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Μοναδιαία κυψελίδα σε 2D

- Η επιλογή της μοναδιαίας κυψελίδας δεν είναι μοναδική



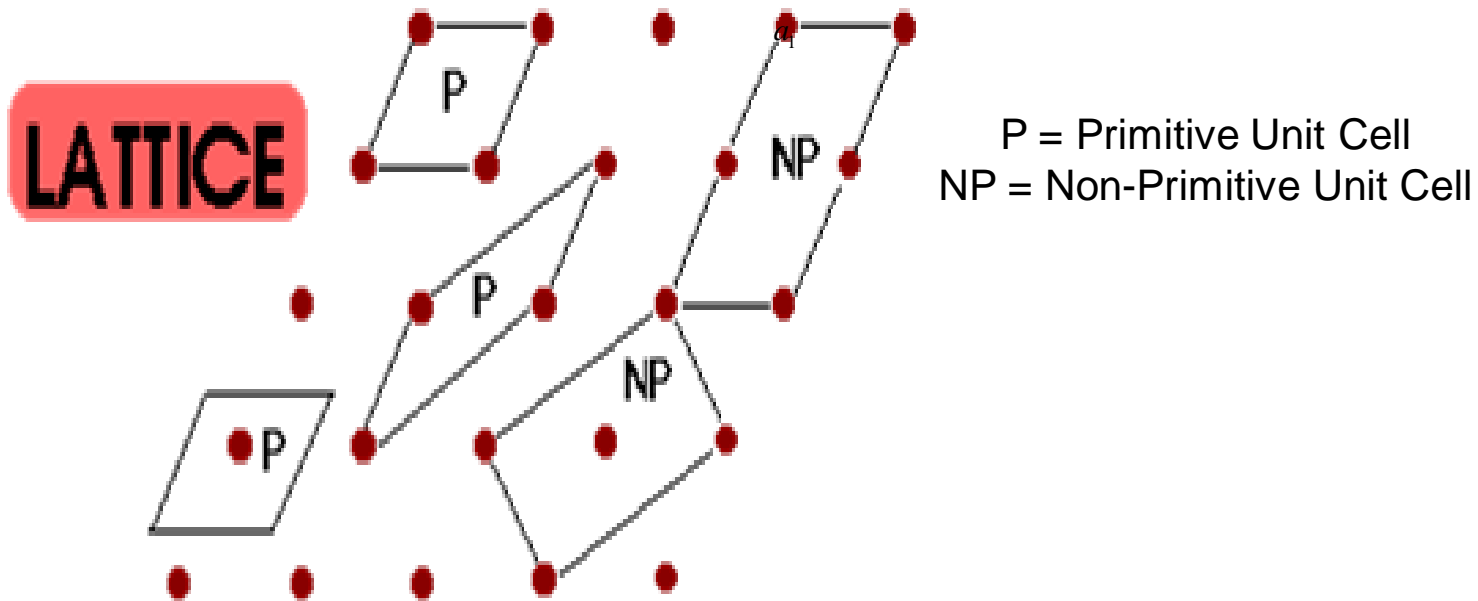
$$T = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} \quad (m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Unit Cell Choice

- There is always more than possible choice of unit cell
 - By convention the unit cell is chosen so that it is as small as possible while reflecting the full symmetry of the lattice
- 1) The highest symmetry
 - 2) The smallest area (or volume)

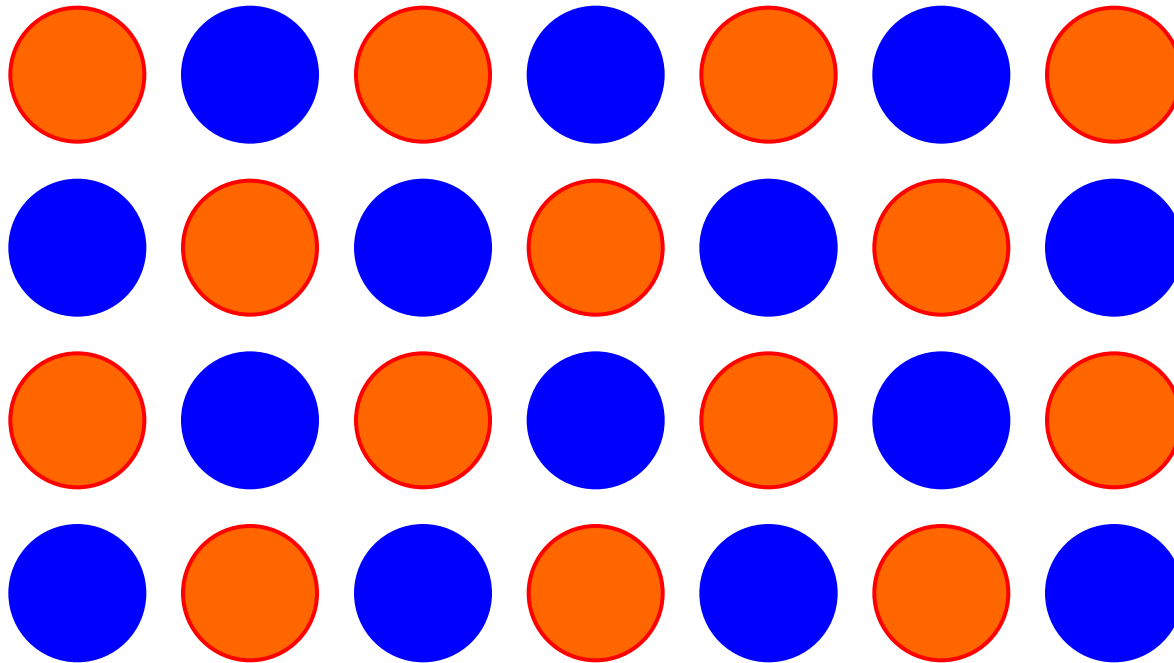
Primitive Unit Cell

- The **primitive unit cell** must have **only one lattice point**.
- There can be **different choices** for lattice vectors , **but the volumes of these primitive cells are all the same.**



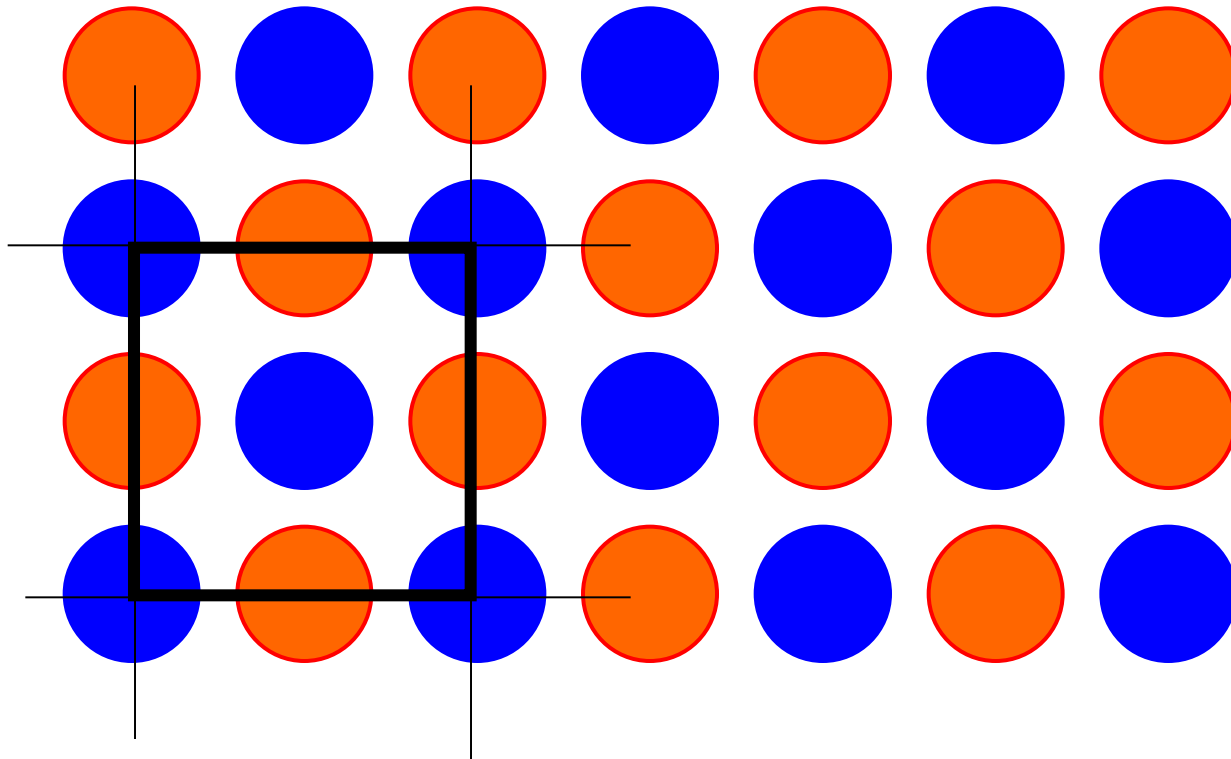
Μοναδιαία κυψελίδα σε 2D

Παράδειγμα: NaCl

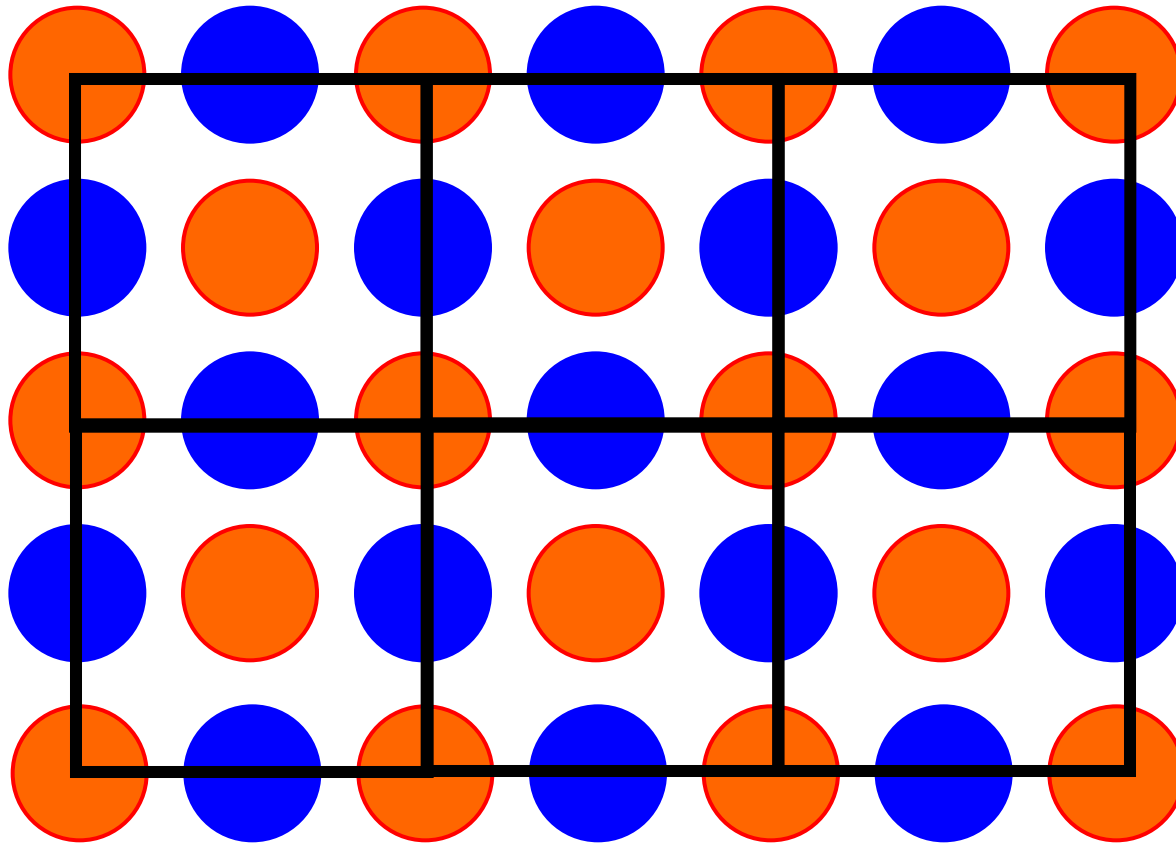


Ο προσδιορισμός των πλεγματικών σημείων γίνεται έτσι ώστε καθένα τους να έχει *το ίδιο περιβάλλον*

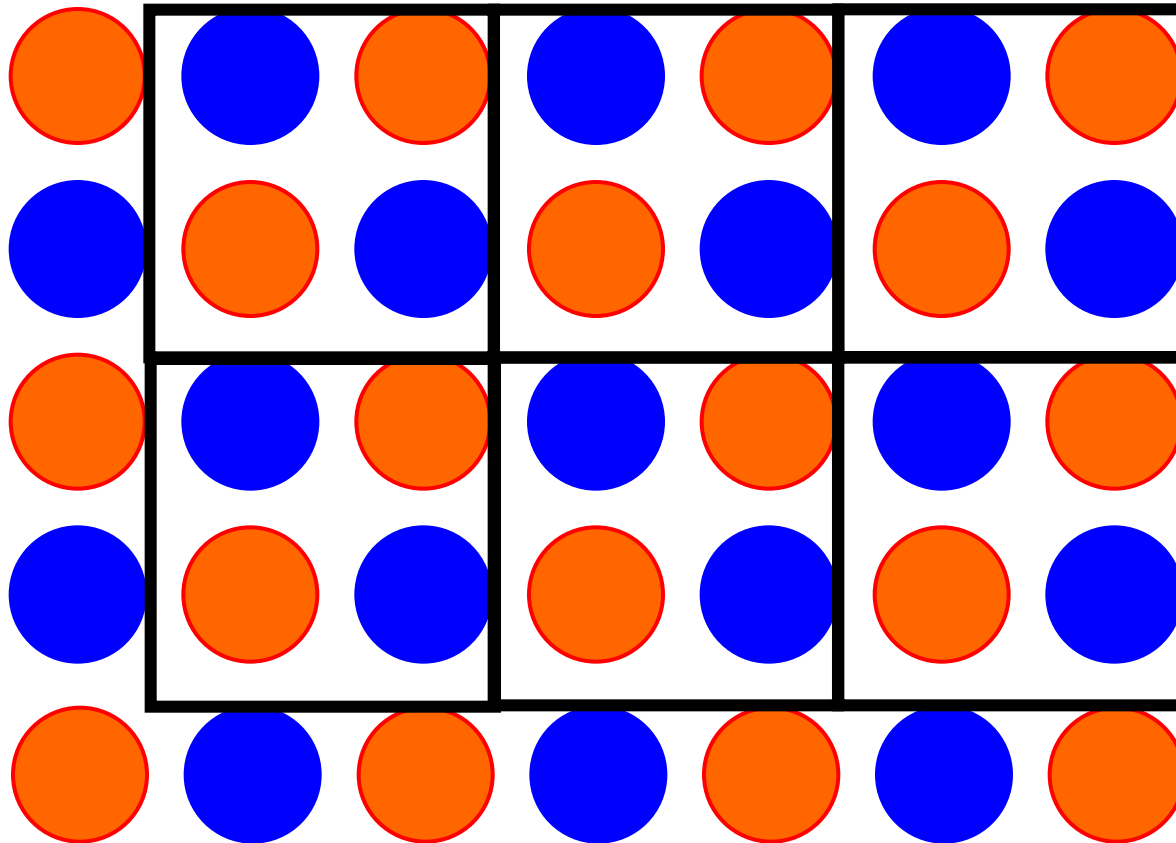
- Η επιλογή της αρχής των αξόνων είναι αυθαίρετη
- Δεν είναι απαραίτητο τα πλεγματικά σημεία να βρίσκονται σε ατομικές θέσεις points need not be atoms
- Η μοναδιαία κυψελίδα πρέπει να είναι η ίδια (μέγεθος και σχήμα) παντού σε όλον τον κρύσταλλο



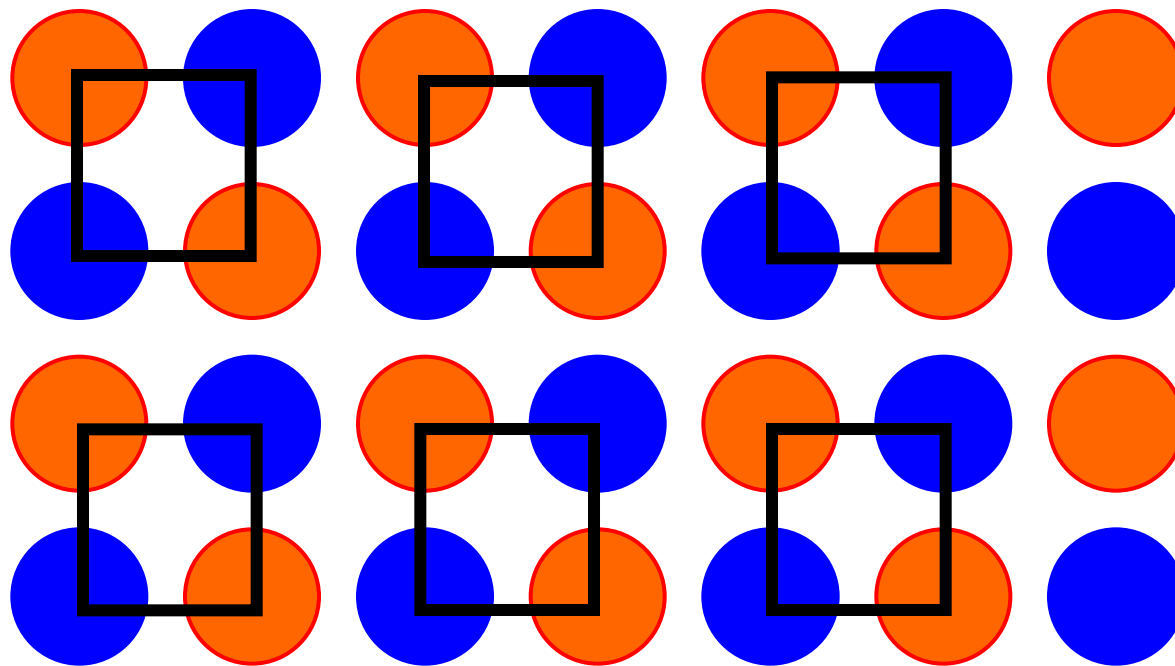
Αυτή είναι επίσης μοναδιαία κυψελίδα. Δεν έχει σημασία αν η αρχή της βρίσκεται σε Na ή Cl



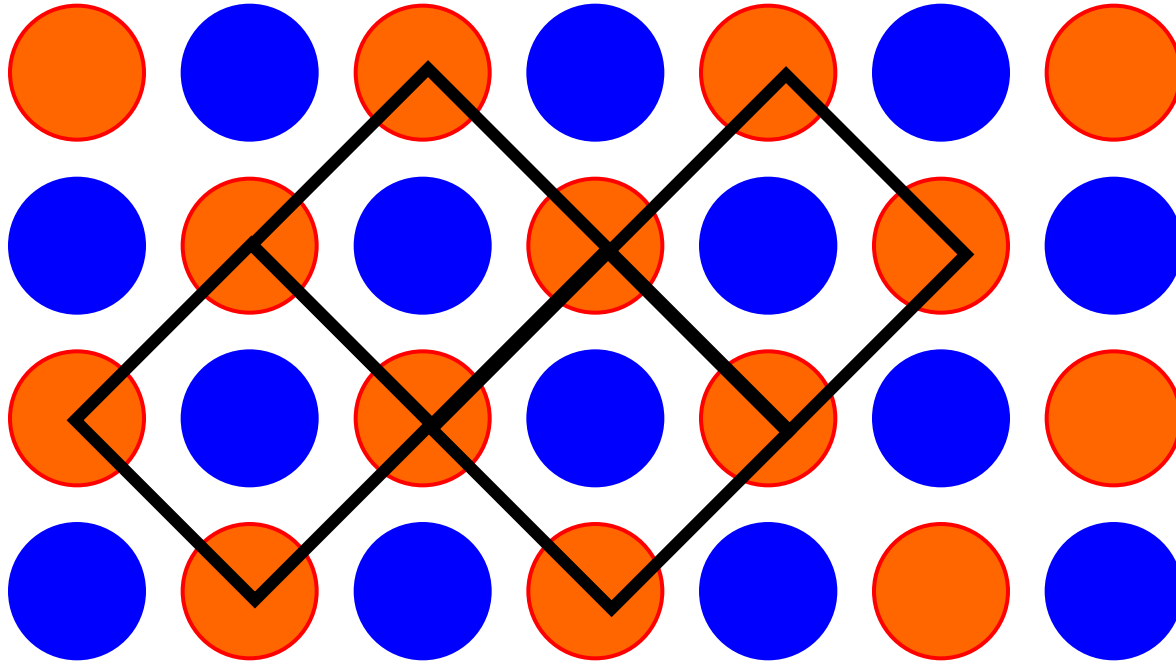
ή δεν βρίσκεται σε καμία ατομική θέση ...



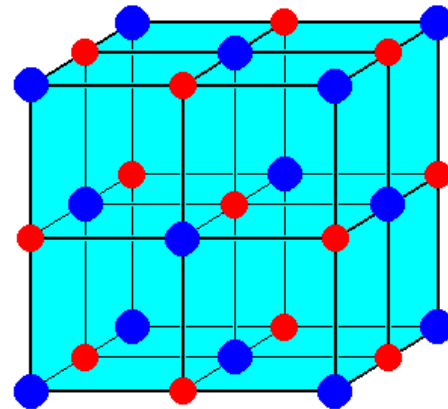
Αυτή ΔΕΝ είναι μοναδιαία κυψελίδα παρόλο που επαναλαμβάνεται παντού η ίδια – δεν επιτρέπεται κενός χώρος!



Σε 2D, αυτή μπορεί να είναι μοναδιαία κυψελίδα

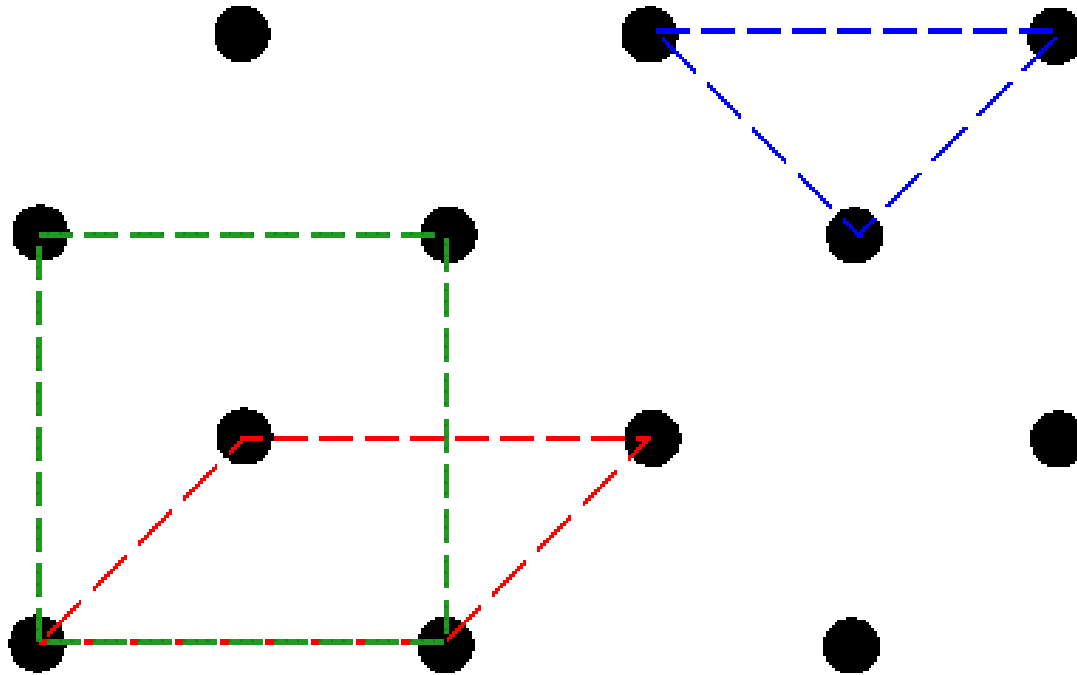


Σε 3D, όμως, **ΌΧΙ!**

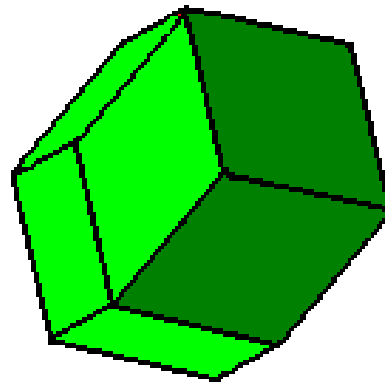
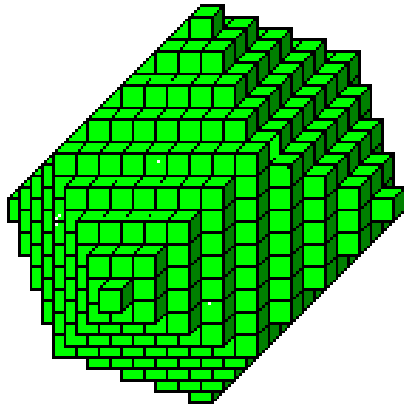
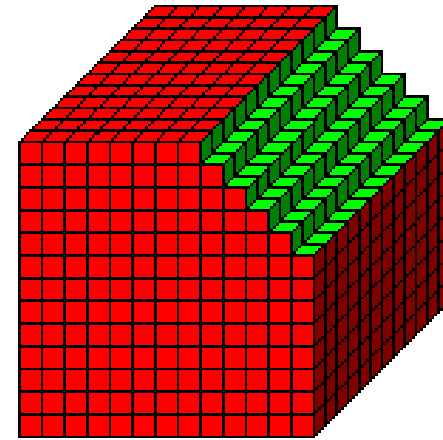
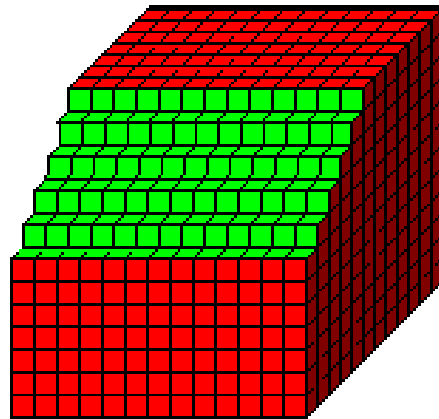
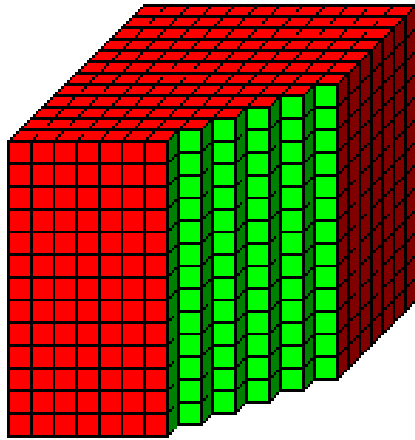


NaCl

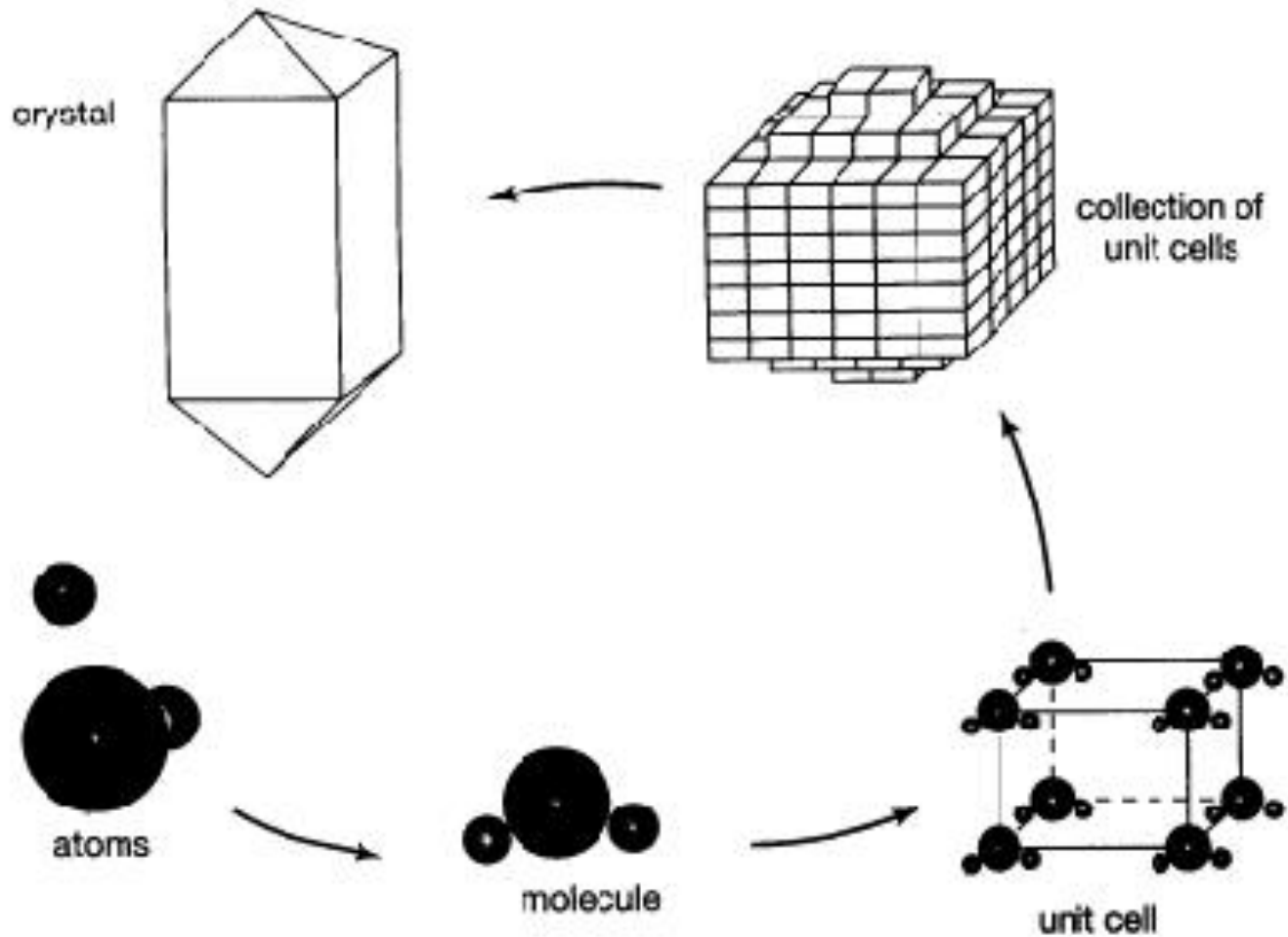
Γιατί το μπλε τρίγωνο δεν μπορεί να είναι μοναδιαία κυψελίδα;



Μοναδιαία κυψελίδα στις 3-διαστάσεις

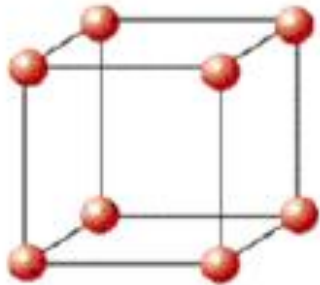


Μοναδιαία κυψελίδα στις 3-διαστάσεις

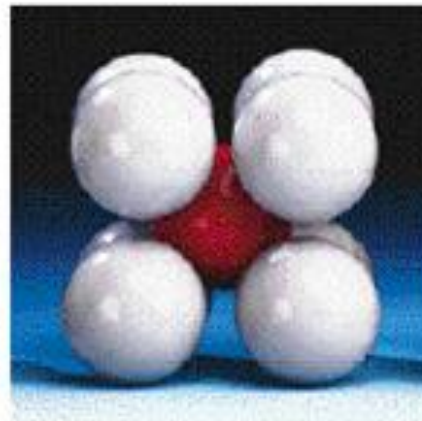
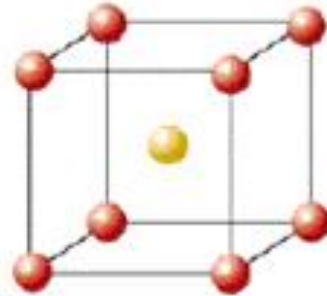


Μοναδιαία κυψελίδα στις 3-διαστάσεις

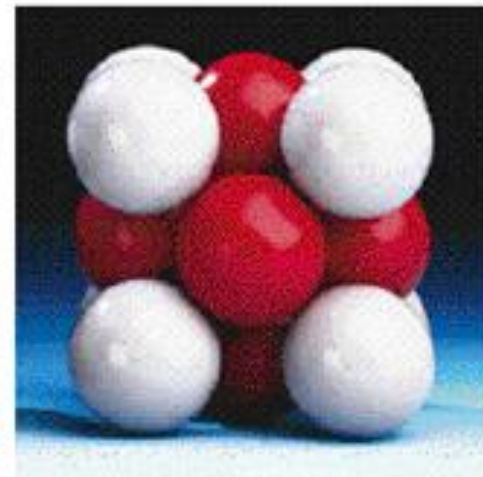
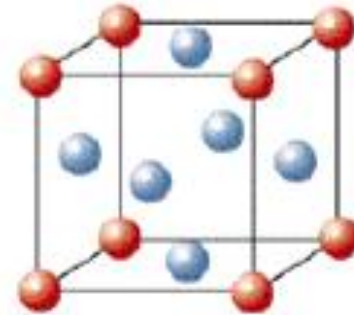
Παραδείγματα



simple cubic

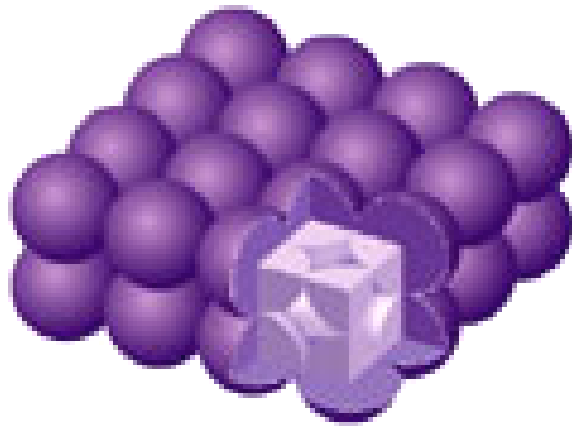
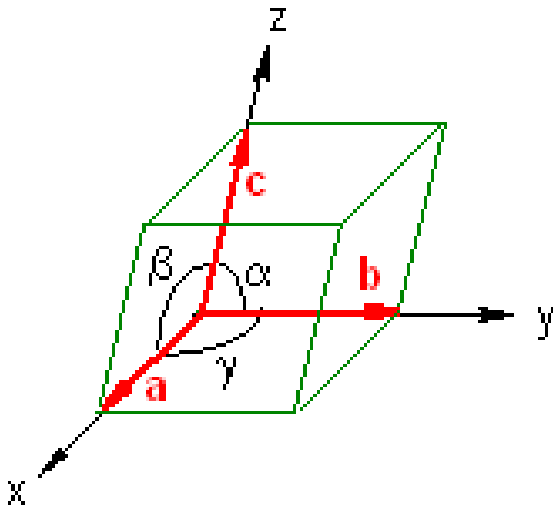


body-centered cubic

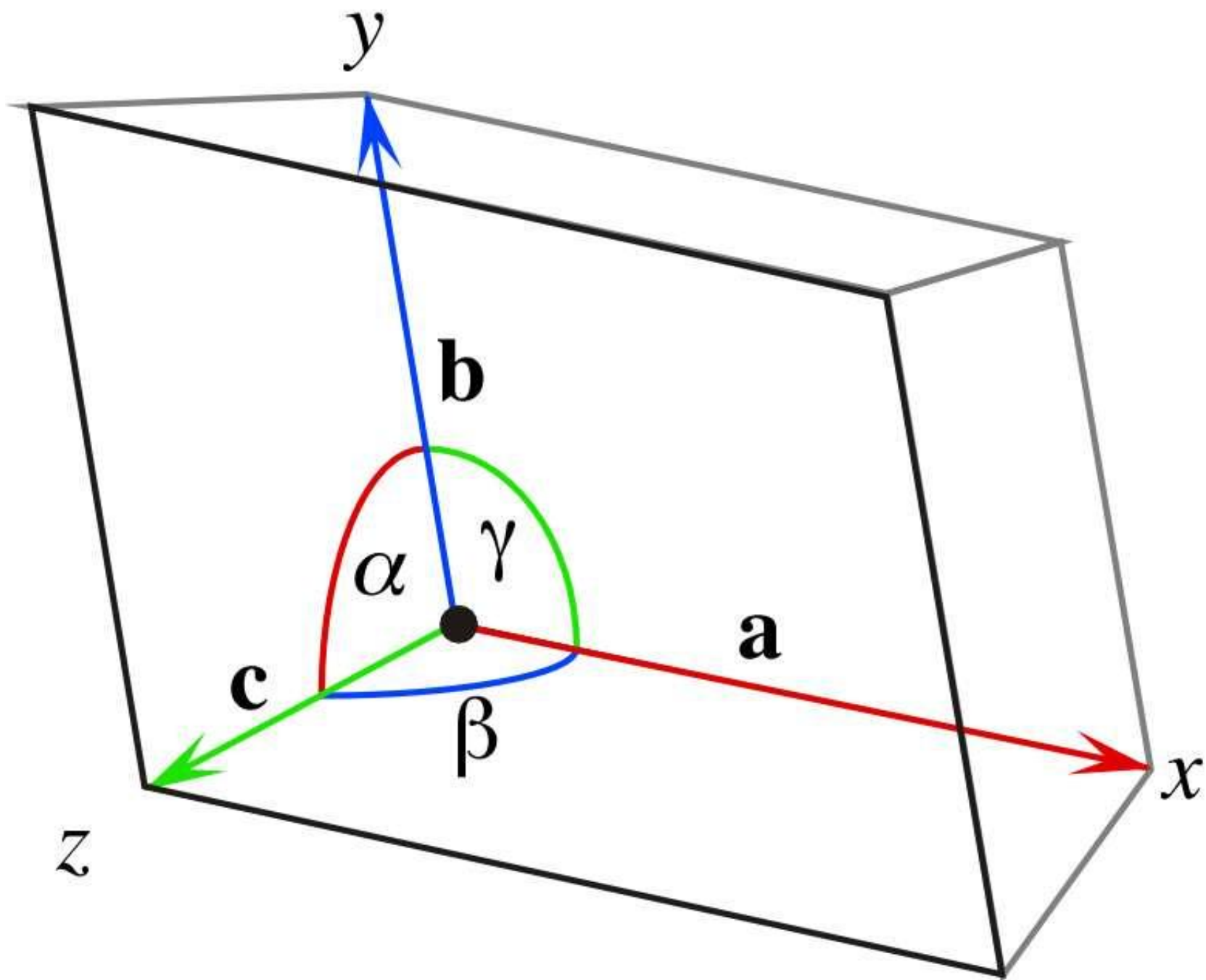


face-centered cubic

Μοναδιαία κυψελίδα στις 3-διαστάσεις

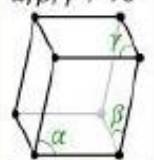
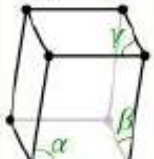

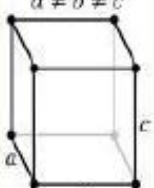
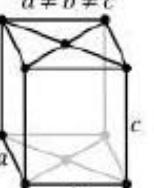
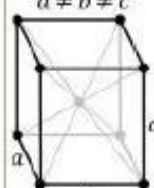
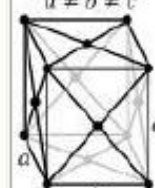
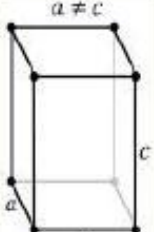
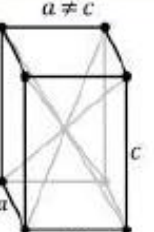
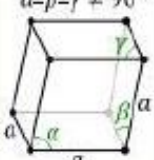


- Η μοναδιαία κυψελίδα και επομένως όλος ο κρύσταλλος, ορίζεται με μοναδικό τρόπο από τις 6 πλεγματικές παραμέτρους: **a, b, c, α , β and γ .**
- Σε απλό πλέγμα (primitive ή simple) μόνο το $1/8$ κάθε πλεγματικού σημείου της μοναδιαίας κυψελίδας αποδίδεται σε αυτήν.
- Επομένως, κάθε μοναδιαία του διπλανού σχήματος αντιστοιχεί σε $8 \times 1/8 = 1$ πλεγματικό σημείο.



Κρυσταλλικά πλέγματα Bravais

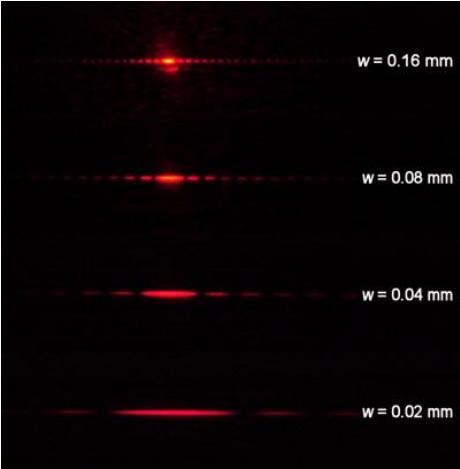
- P απλό
- C μονοεδρικά κεντρωμένο
- F ολοεδρικά κεντρωμένο
- I ενδοκεντρωμένο

Κρυσταλλικό σύστημα	Κρυσταλλικά πλέγματα			
<u>Τρικλινές</u>	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 			
<u>Μονοκλινές</u>	απλό	κεντρωμένο		
	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 		
<u>Ορθορμβικό</u>	απλό	μονοεδρικά κεντρωμένο	ενδοκεντρωμένο	ολοεδρικά κεντρωμένο
	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 
	απλό	ενδοκεντρωμένο		
	$a \neq c$ 	$a \neq c$ 		
<u>Ρομβοεδρικό</u>	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ 			

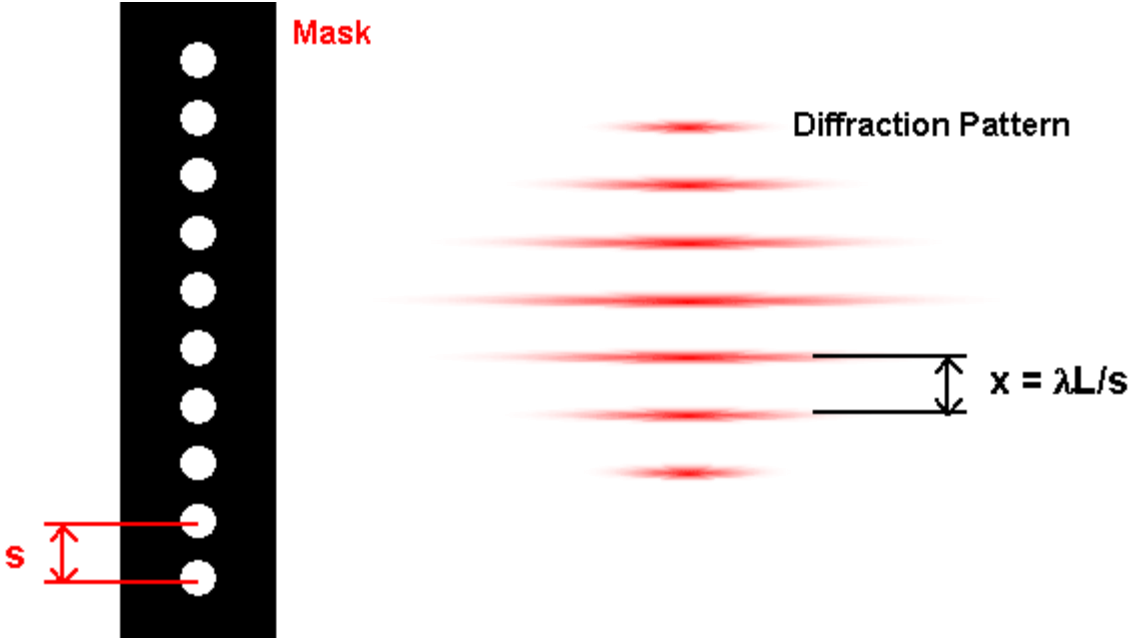
Κυβικό
 $a=b=c$
 $\alpha=\beta=\gamma=90$

ΕΙΚΟΝΕΣ ΠΕΡΙΘΛΑΣΗΣ (Diffraction patterns) 1-D

1 σχισμή εύρους w

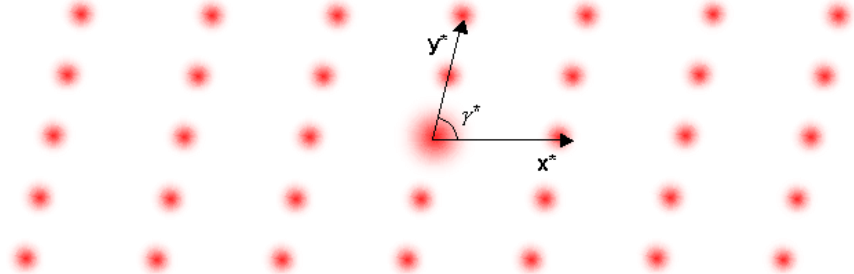
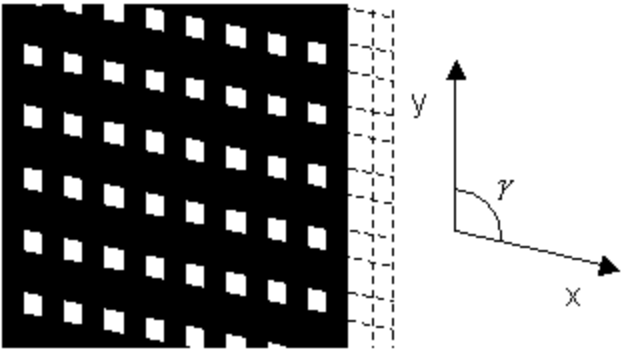
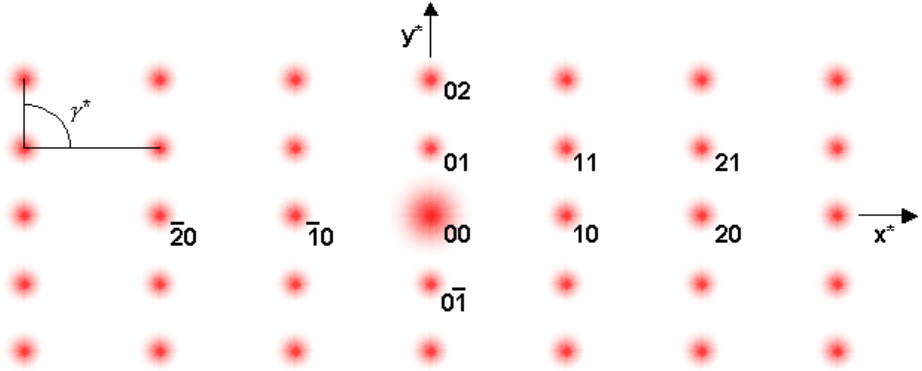
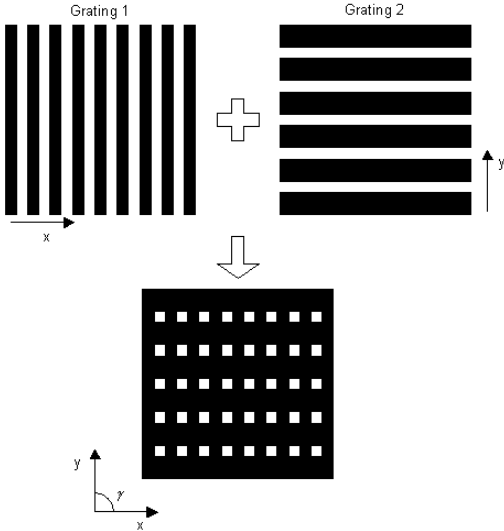


Μονοδιάστατο πλέγμα

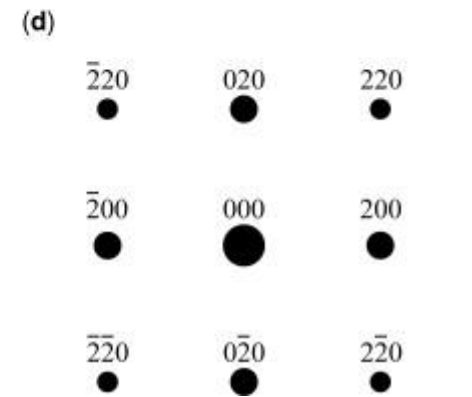
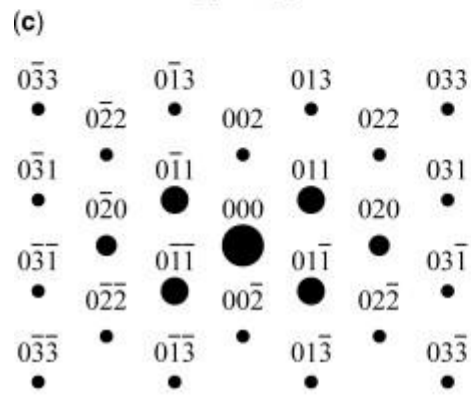
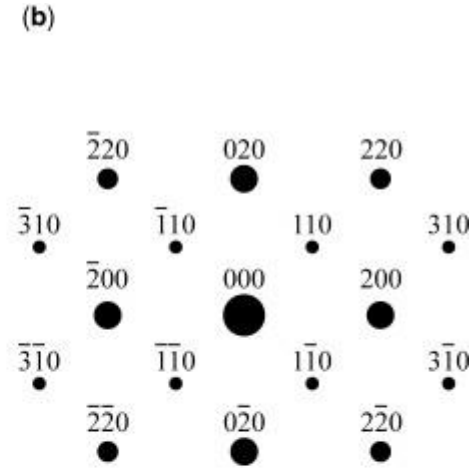
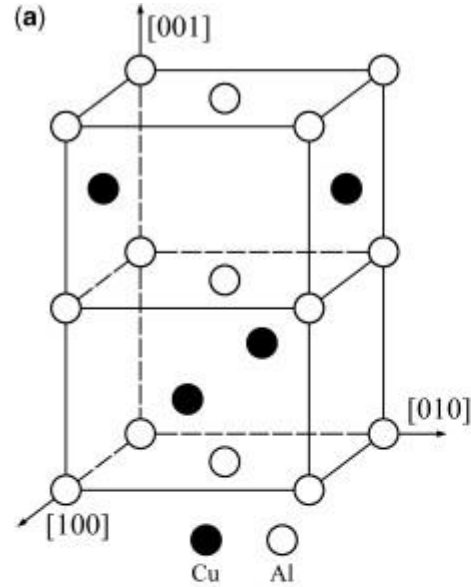
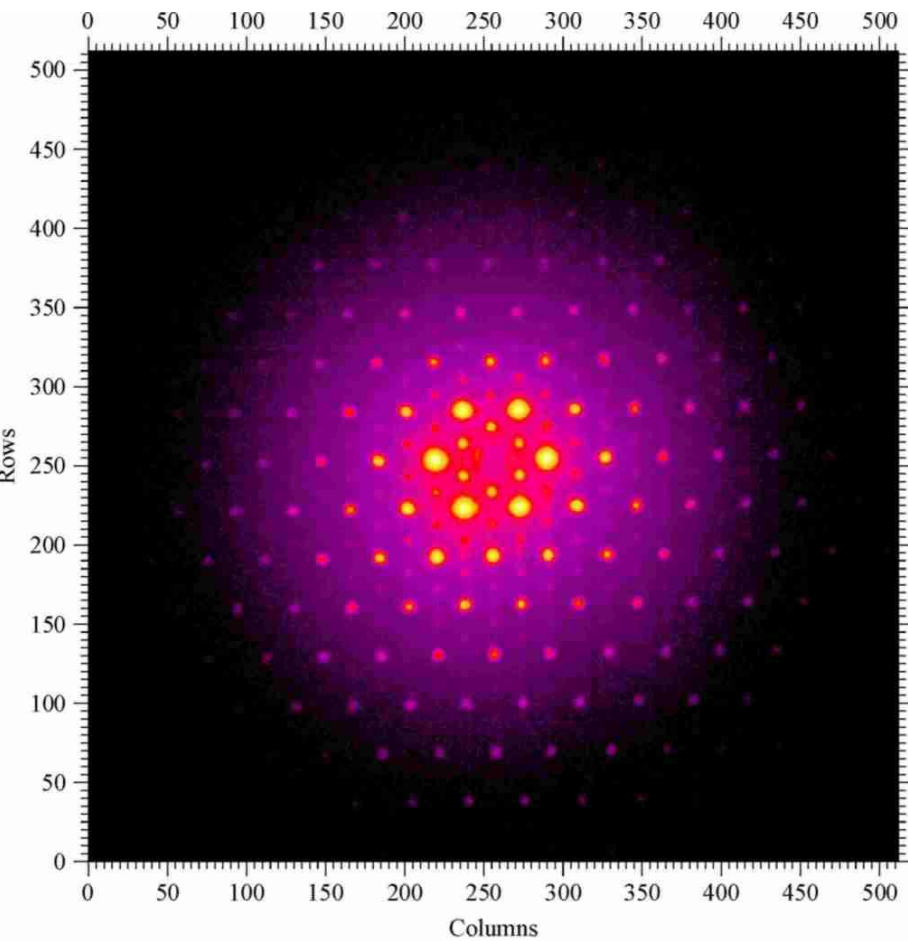


ΕΙΚΟΝΕΣ ΠΕΡΙΘΛΑΣΗΣ (Diffraction patterns) 2-D

Διδιάστατο πλέγμα



ΕΙΚΟΝΕΣ ΠΕΡΙΘΛΑΣΗΣ (Diffraction patterns) 3-D



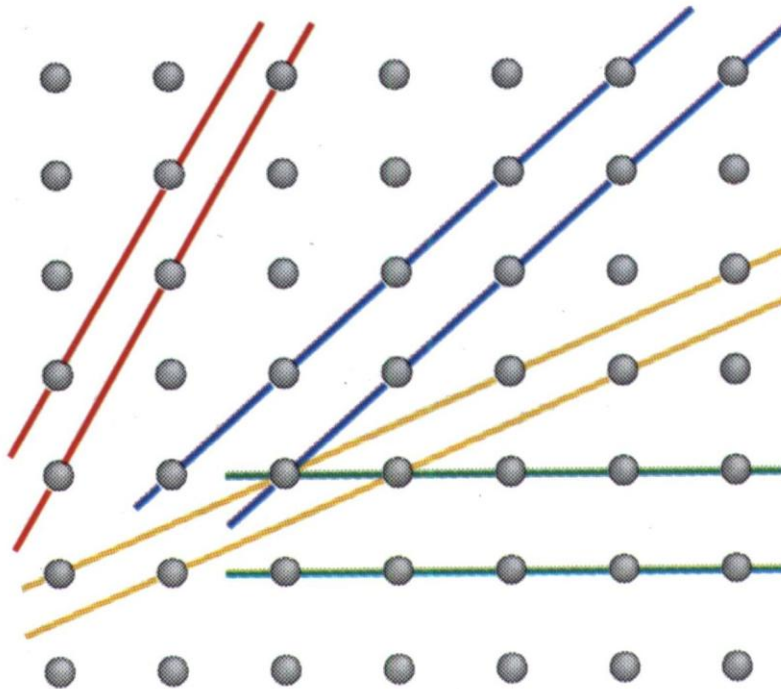
W. H. Bragg: Πατήρ,

W. L. Bragg: Υιός

Nobel, 1915

και ο νόμος των ανακλάσεων $2d \sin\theta_m = m\lambda$

Αν ένας κρύσταλλος είχε συντεθεί από ένα είδος ατόμων που απείχαν ίδια απόσταση d μεταξύ τους σε δύο διαστάσεις μπορούμε να φανταστούμε διάφορα σύνολα επιπέδων τα οποία διέρχονται σε διαφορετικές διευθύνσεις και περιέχουν διαφορετικές ομάδες ατόμων



Επίπεδα ανάκλασης

ή

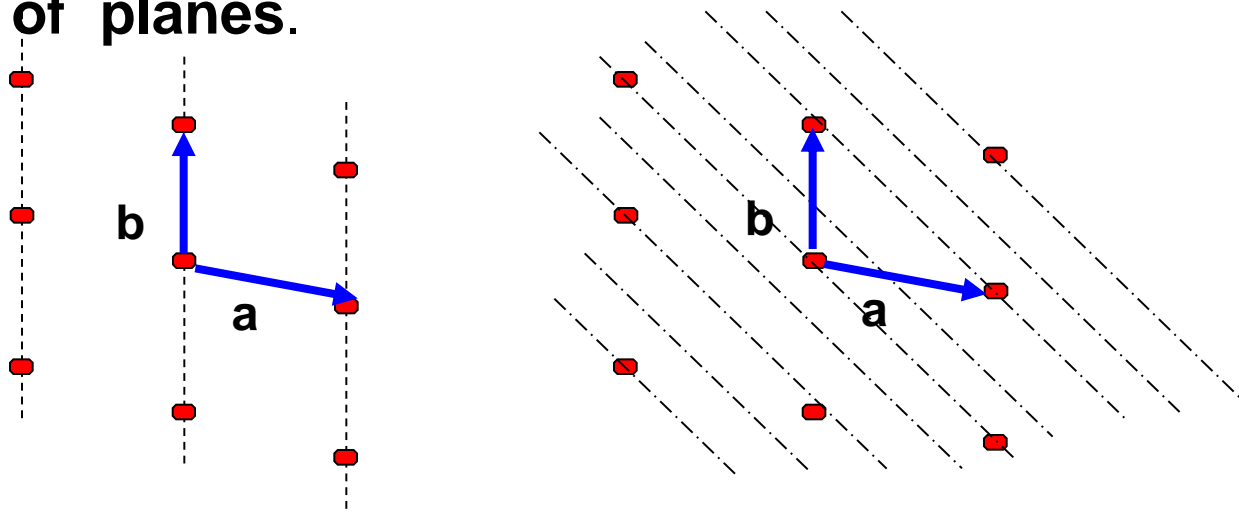
Κρυσταλλικά επίπεδα

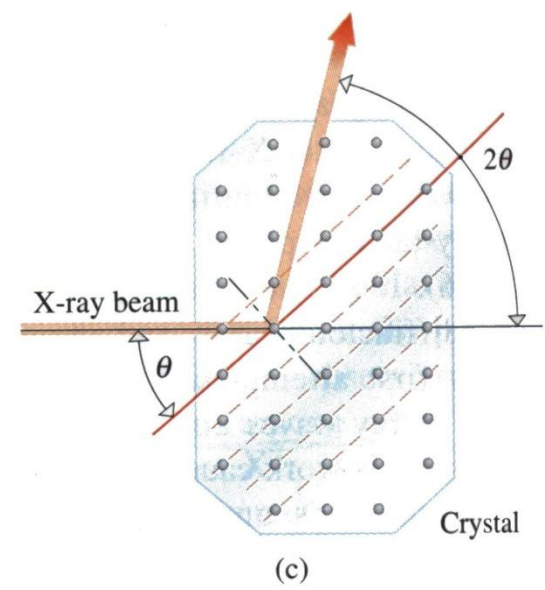
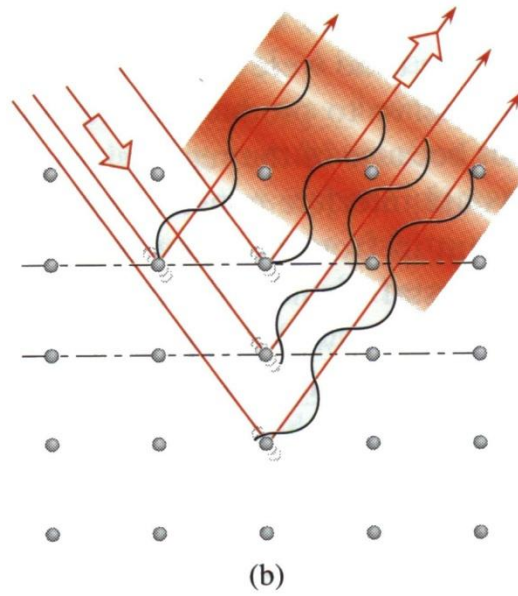
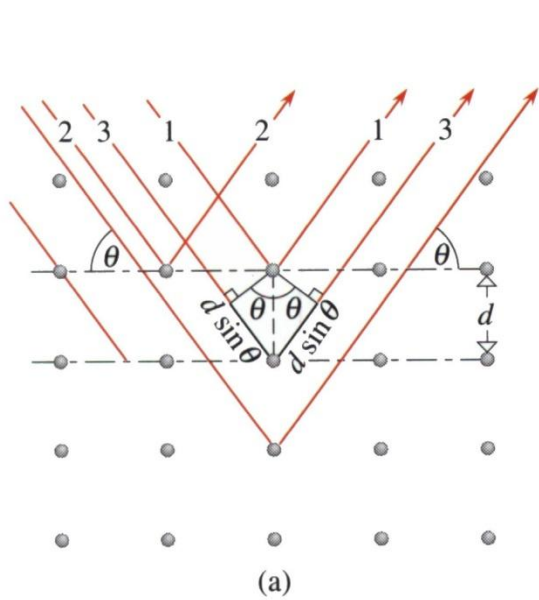
$(h k l)$

Crystal Planes

- Within a crystal lattice it is possible to identify sets of equally spaced parallel planes. These are called **lattice planes**.
- In the figure density of **lattice points on each plane of a set is the same** and all lattice points are contained on each set of planes.

The set of planes in 2D lattice.





Ακτίνες X που προσπίπτουν σε ένα "ατομικό επίπεδο" με γωνία θ ως προς αυτό, καθώς *"ανακλώνται"* θα εμφανίσουν φαινόμενα συμβολής με μέγιστο έντασης όταν η διαφορά δρόμου των δύο συμβαλλόντων κυμάτων είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος λ της ακτινοβολίας X:

$$2d \sin\theta = n\lambda$$

$$(n = 1, 2, 3, \dots)$$

Άσκηση

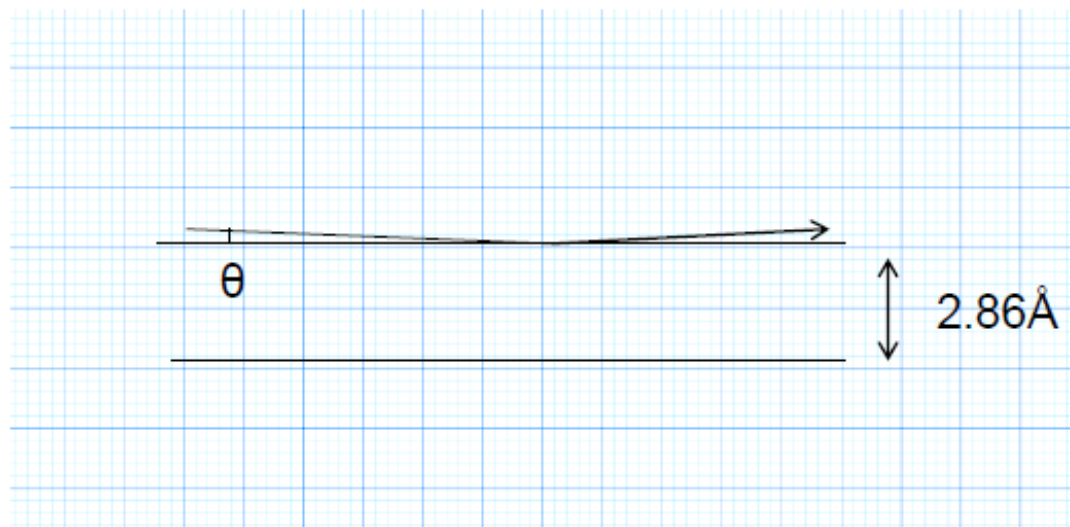
Θεωρείστε πλέγμα αποτελούμενο από άτομα που ισαπέχουν κατά 2.86\AA προς όλες τις διευθύνσεις (κυβικό πλέγμα). Εάν κρύσταλλος αυτού του υλικού ακτινοβοληθεί με ακτίνες X μήκους κύματος 0.585\AA σε ποιές γωνίες παρατηρούνται ανακλάσεις Bragg από τα επίπεδα που απέχουν $d=2.86\text{\AA}$; (Παρατηρούνται περισσότερα από ένα σέτ ανακλάσεων αλλά δεν θα ασχοληθούμε με την πολυπλοκότητα αυτή εδώ). Σχεδιάστε σε χαρτί μιλιμετρέ το επίπεδο ab του πλέγματος και πάνω σε αυτό την πρώτη προσπίπτουσα και ανακλώμενη ακτίνα που βρίσκονται σε αυτό το επίπεδο.

Λύση

Από νόμο του Bragg $2d \sin\theta = n\lambda$ ($n=0, 1, 2, 3, \dots$) (1)

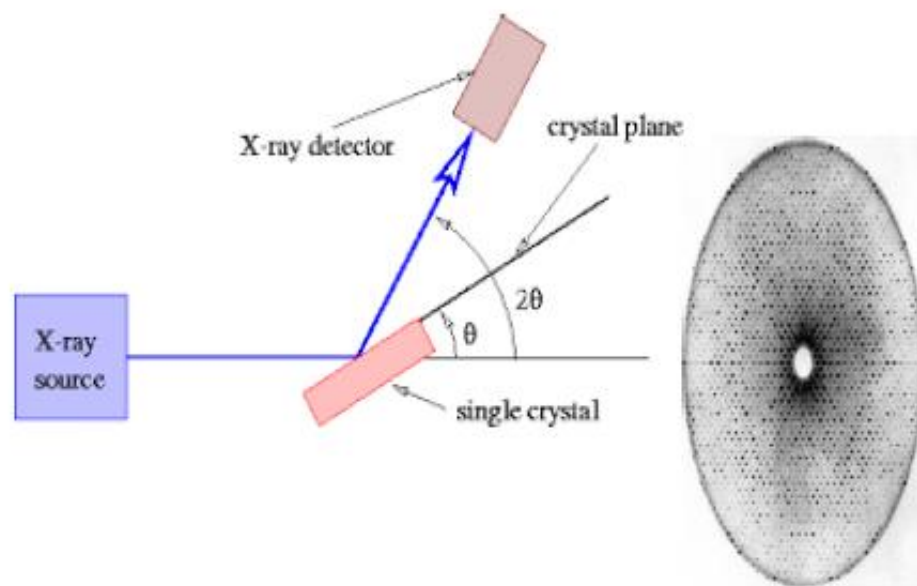
Και επειδή $\lambda=0.585\text{\AA}$ και $d=2.86\text{\AA}$ αντικαθιστώντας στην (1)

Έχουμε $2 \cdot 2.86 \cdot \sin\theta = n \cdot 0.585$ λύνοντας ως προς $\sin\theta$ προκύπτει $\sin\theta = n(0,1022)$ επειδή το n είναι ακέραιος αριθμός και επειδή το $\sin\theta$ παίρνει τιμές από $0 \leq \sin\theta \leq 1$ άρα έχουμε 9 γωνίες με $n=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$. Άρα για $n=1$, $\theta = \sin^{-1}(0,1022) = 5,86^\circ$, για $n=2$, $\theta = \sin^{-1}(0,2044) = 11,79^\circ$ κ.ο.κ



Περίθλαση ακτίνων-Χ από κρυστάλλους

Μια τυπική διάταξη του πειράματος περίθλασης φαίνεται στο παρακάτω σχήμα :



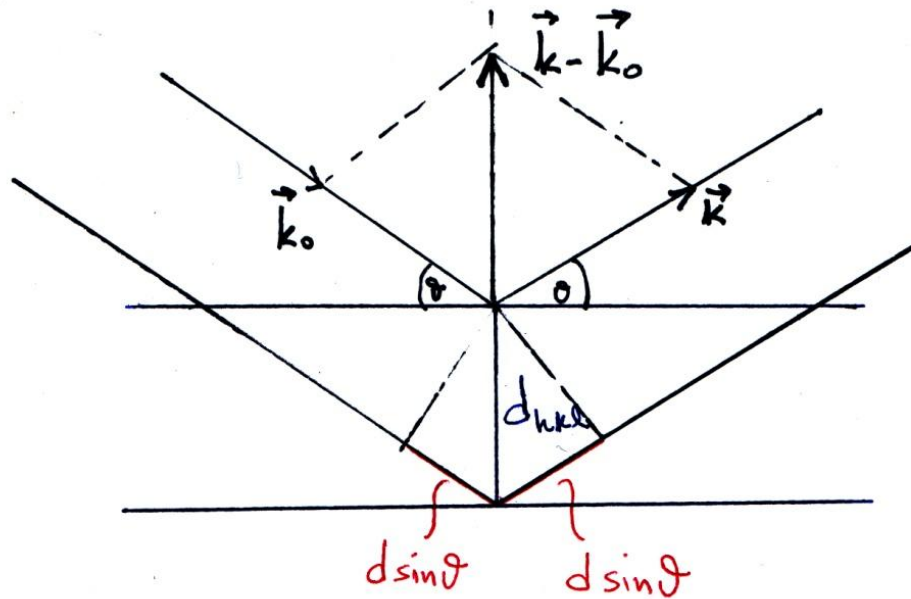
Προκύπτει με απλή γεωμετρία ότι η γωνία της προσπίπτουσας δέσμης με την σκεδαζόμενη δέσμη είναι 2θ .

Διάνυσμα σκέδασης και Νόμος Bragg

\mathbf{k}_0 : Κυμαάνυσμα προσπίπτουσας ακτινοβολίας (κατεύθυνση στη διάδοση του προσπίπτοντος κύματος, μέτρο = $2\pi/\lambda$)

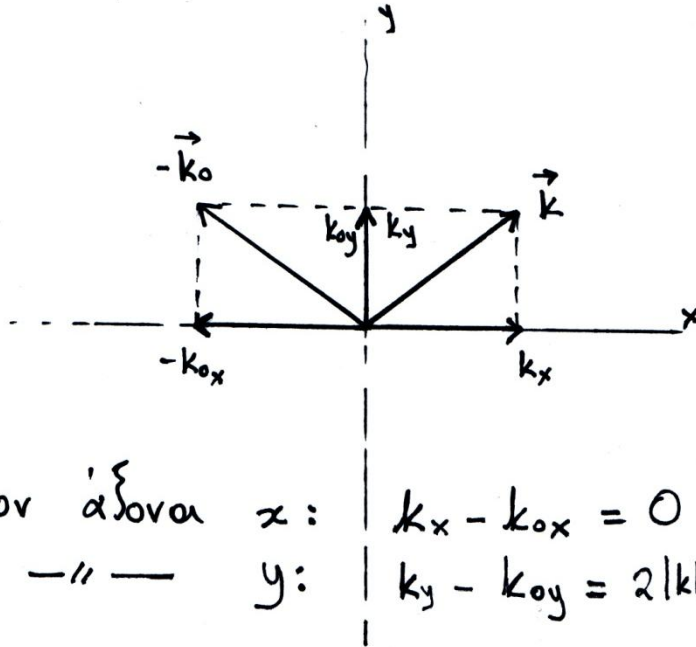
\mathbf{k} : Κυμαάνυσμα ανακλώμενης ακτινοβολίας (κατεύθυνση στη διάδοση του ανακλώμενου κύματος, μέτρο = $2\pi/\lambda$)

$\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$: Διάνυσμα σκέδασης, κάθετο στο επίπεδο ανάκλασης και μέτρου
 $|\Delta\mathbf{k}| = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$



$$N. \text{ Bragg} : \quad 2 d_{hkl} \sin\theta = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1)$$

Διάγραμμα σκέδασης και Νόμος Bragg



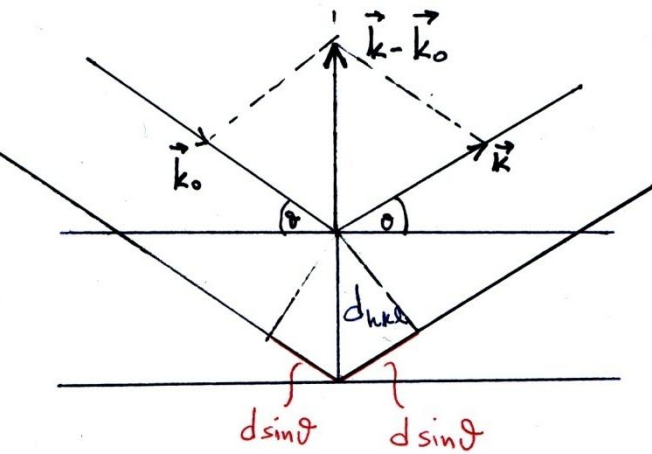
$$|\vec{k}_0| = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \left(\begin{array}{l} \text{\textcircled{S}} \text{ΚΕΔΑΣΗ} \\ \text{THOMSON} \end{array} \right)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{\textcircled{S}} \text{ΤΟΝ \textit{á}\xi\textit{o}\nu\alpha} \ x: \quad k_x - k_{0x} = 0 \\ \text{\textcircled{S}} \text{ΤΟΝ \textit{á}\xi\textit{o}\nu\alpha} \ y: \quad k_y - k_{0y} = 2|\vec{k}| \sin\theta = 2 \frac{2\pi}{\lambda} \sin\theta \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |\vec{k} - \vec{k}_0| = \frac{2 \sin\theta}{\lambda} 2\pi \quad (2)$$

$$(1) \xRightarrow{\text{για } n=1} \frac{2 \sin\theta}{\lambda} = \frac{1}{d_{hkl}} \quad \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{|\vec{k} - \vec{k}_0|}{2\pi} = \frac{1}{d_{hkl}}} \quad (3)$$



$$\frac{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|}{2\pi} = \frac{1}{d_{hkl}}$$

Ορίζεται d_{hkl}^* διάνυσμα κάθετο στην οικογένεια επιπέδων hkl και μέτρου $1/d_{hkl}$

Μονάδες: \AA^{-1} (αντίστροφος χώρος)

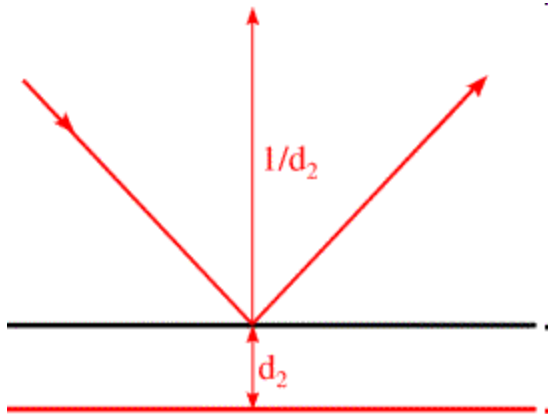
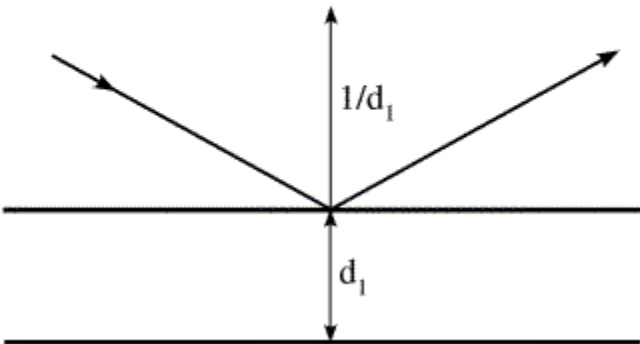
Αντίστροφο Διάνυσμα

- Κατεύθυνση αυτή του διανύσματος σκέδασης
- Μέτρο = μέτρο διανύσματος σκέδασης / $2\pi = 2\sin\theta/\lambda$

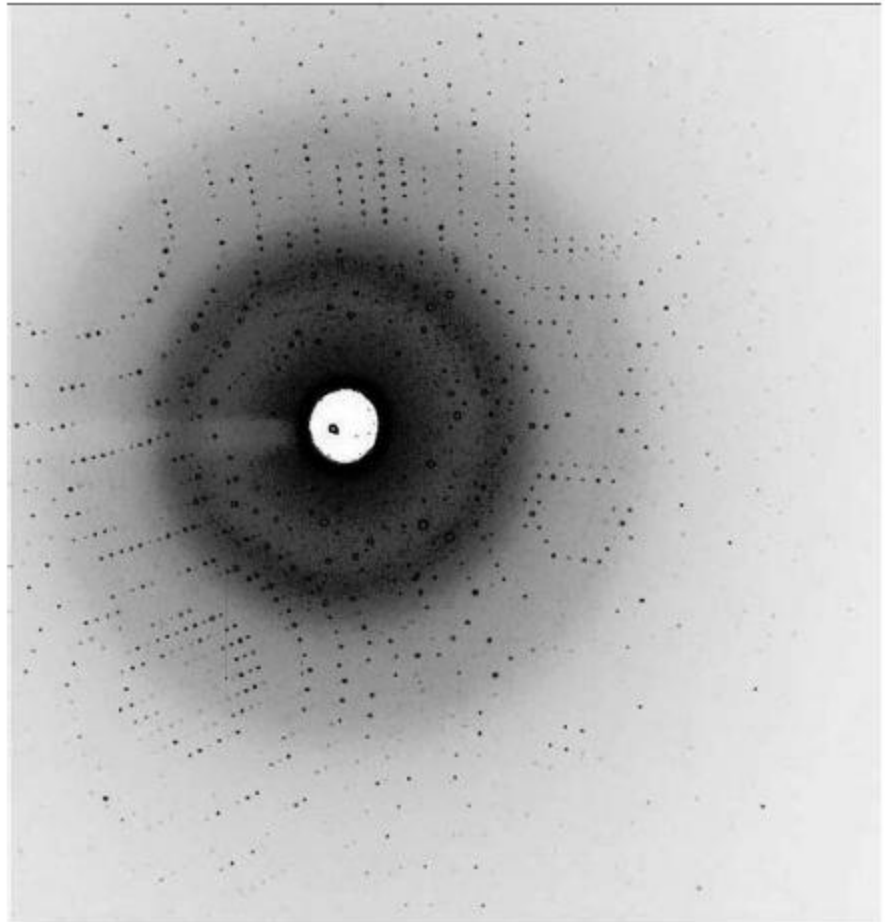
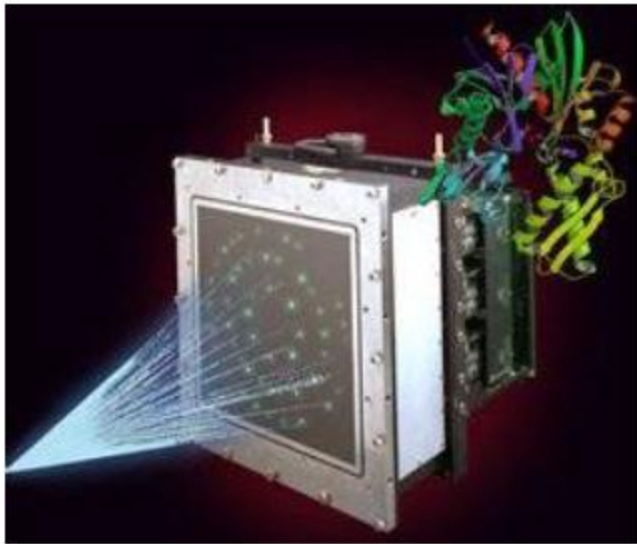
Από τον ορισμό του:

$$\frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_0}{2\pi} = \mathbf{d}_{hkl}^* = \mathbf{H}$$

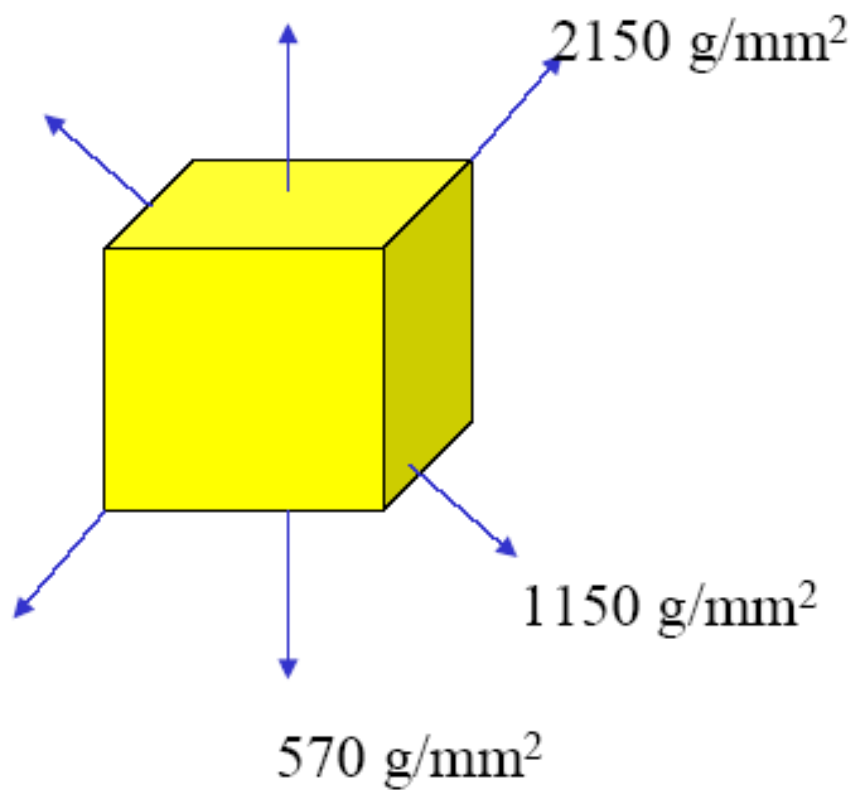
όπου \mathbf{H} άλλος συμβολισμός για το διάνυσμα \mathbf{d}_{hkl}^*



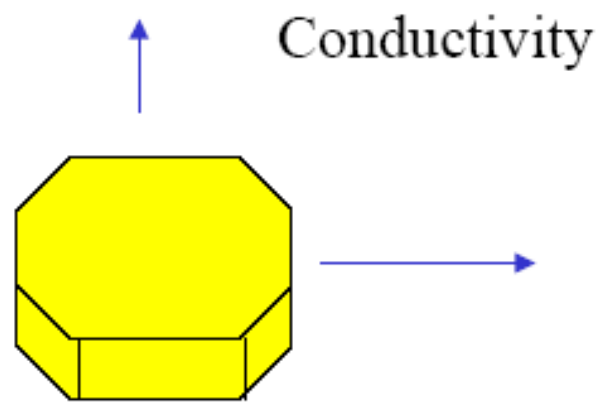
Ο **ανιχνευτής** (detector) καταγράφει τις ανακλάσεις και μας δίνει φωτογραφίες από τις οποίες μπορούμε να προσδιορίσουμε την **θέση** και **ένταση** I_{hkl} των ανακλάσεων. Αναλύοντας αυτές τις πληροφορίες μπορούμε να προσδιορίσουμε τη δομή των μορίων στον κρύσταλλο. Όσο μεγαλύτερη είναι η γωνία 2θ όπου παρατηρούνται ανακλάσεις τόσο καλύτερη είναι η διακριτική ικανότητα του πειράματος.



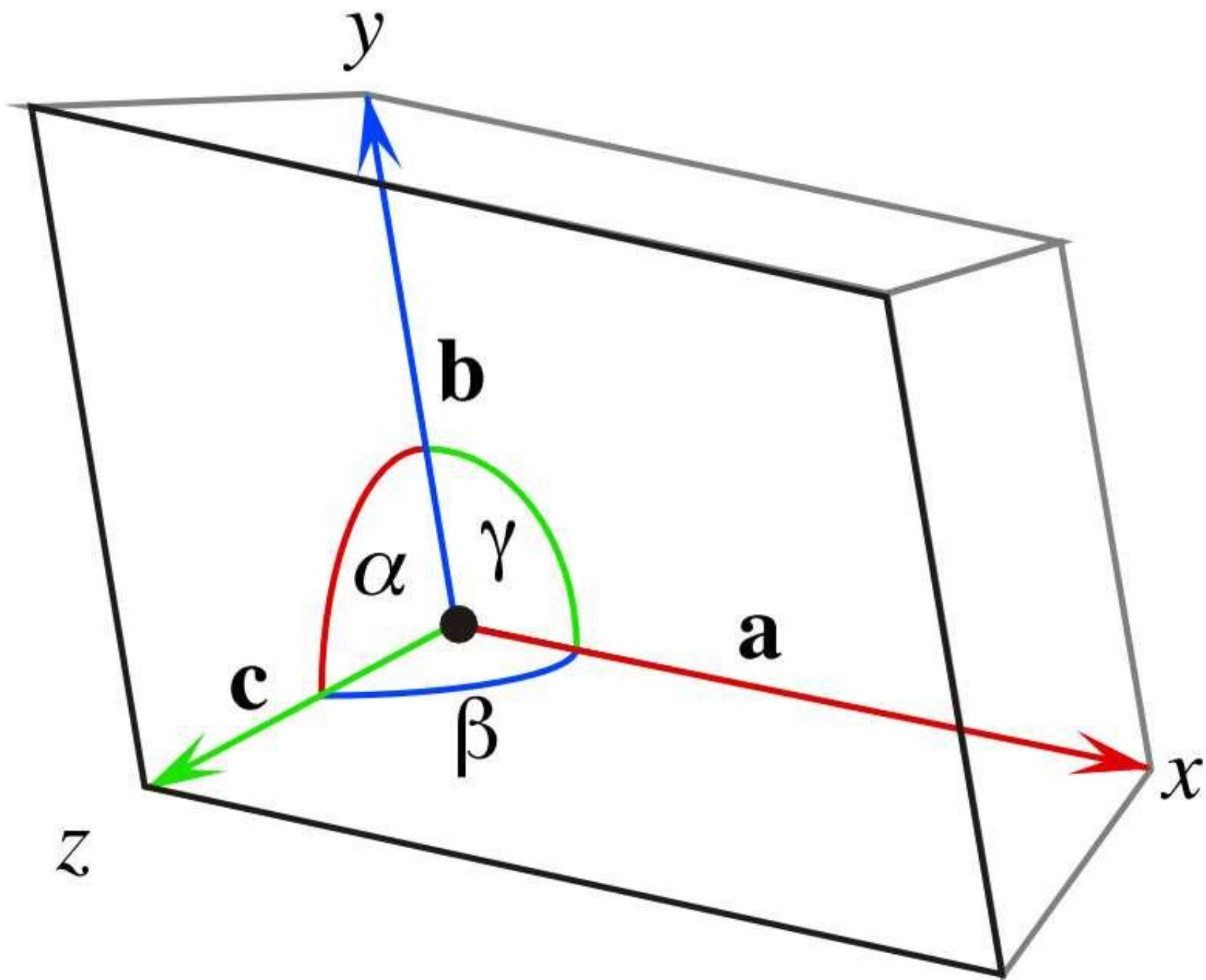
• Anisotropy



NaCl



Graphite



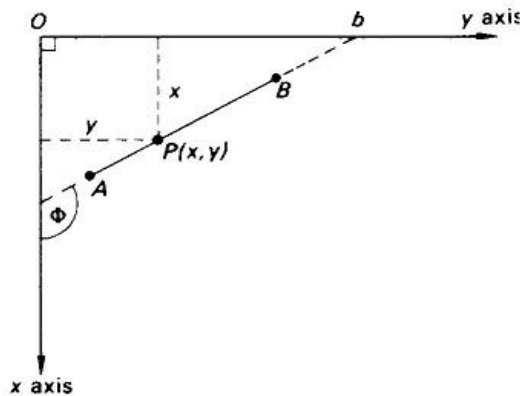
- Μια ευθεία περιγράφεται από μια εξίσωση της μορφής:

$$Y = M \cdot X + b$$

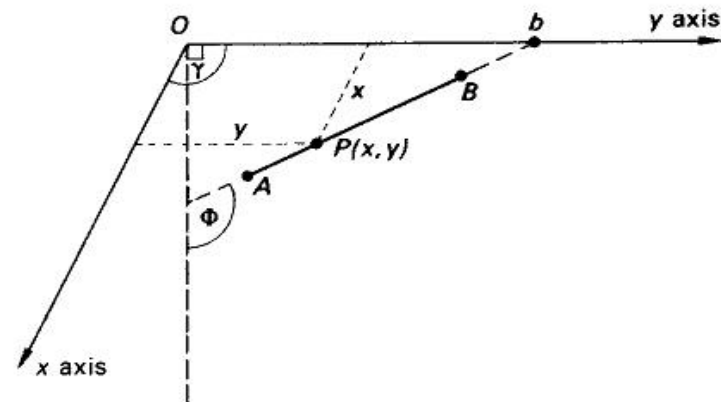
$$M = \tan \Phi$$

$$Y = M \cdot X + b$$

$$M = \tan \Phi \cdot \sin \gamma - \cos \gamma$$



Καρτεσιανό σύστημα

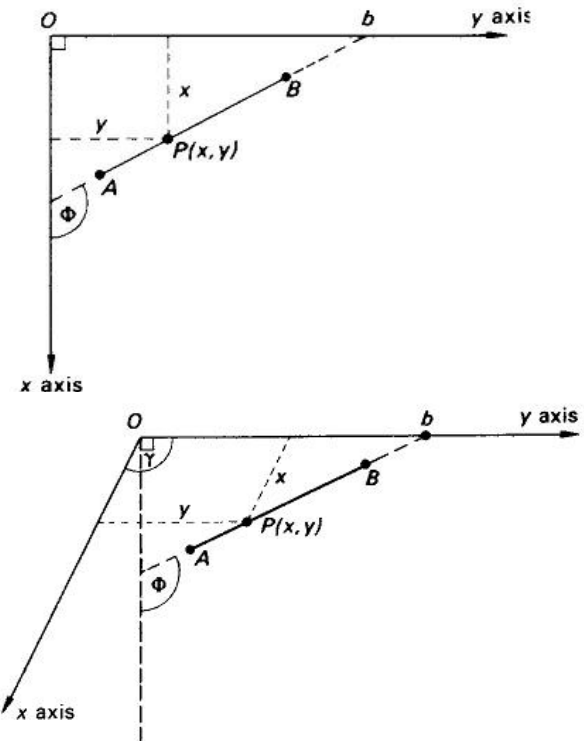


Πλάγιο σύστημα

- Η προηγούμενη περιγραφή (αναλυτική) εξαρτάται από το σύστημα που χρησιμοποιούμε. Μπορούμε να περάσουμε στην περιγραφή μιας ευθείας χρησιμοποιώντας τις επί τη αρχή συντεταγμένες που έχει τη μορφή:

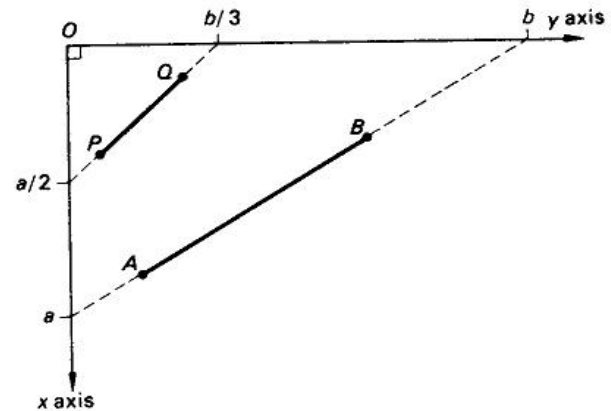
$$\frac{X}{a} + \frac{Y}{b} = 1$$

και για τα δύο συστήματα.



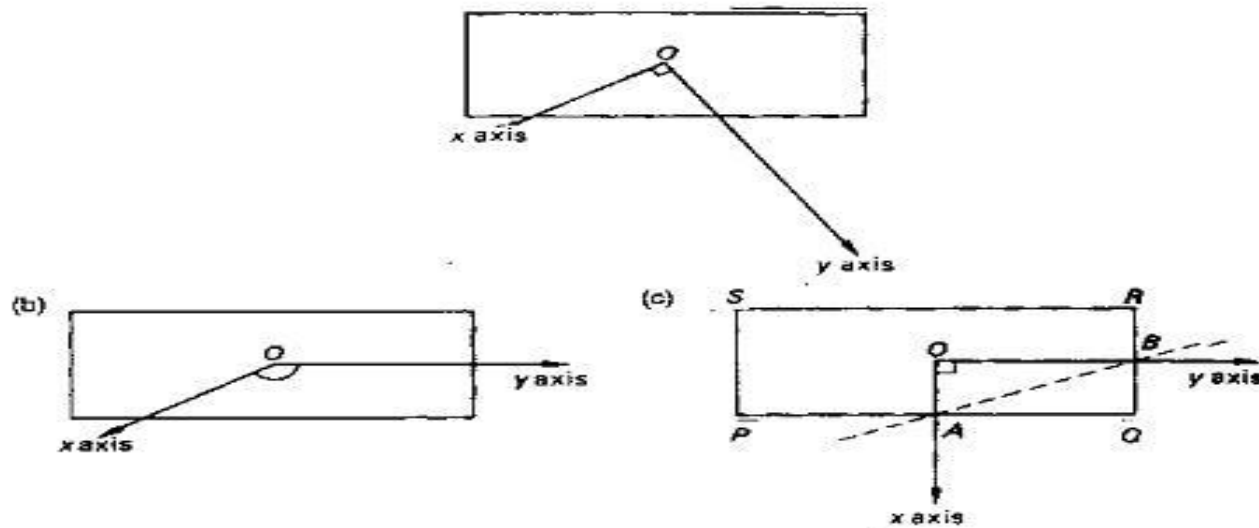
- Αν περιγράψουμε με τον προηγούμενο τρόπο μια ευθεία AB τότε οποιαδήποτε άλλη ευθεία PQ μπορεί να περιγραφεί ως εξής:
 - 1) Η ευθεία PQ τέμνει τους άξονες στα σημεία $a/2$ και $b/3$.
 - 2) Θα περιγράψουμε την ευθεία PQ με τους αριθμούς

$$(h \ k) = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & \frac{b}{3} \\ \frac{a}{a} & \frac{b}{b} \end{pmatrix} = (2 \ 3)$$



Ποιοι αριθμοί περιγράφουν την AB;

- Το σύστημα των αξόνων που θα χρησιμοποιήσουμε εξαρτάται κάθε φορά από τις ευθείες που πρέπει να περιγράψουμε.
- Ποιο σύστημα αξόνων νομίζετε ότι θα χρησιμοποιήσουμε για να περιγράψουμε τις ευθείες ενός ορθογωνίου;



Ποιοι αριθμοί περιγράφουν τις PQ , RQ , SP , SR ;

- Μπορούμε να γενικεύσουμε την προηγούμενη ιδέα προκειμένου να περιγράψουμε επίπεδα.

1) Επίπεδο ABC: (111).

2) Επίπεδο LMN (432).

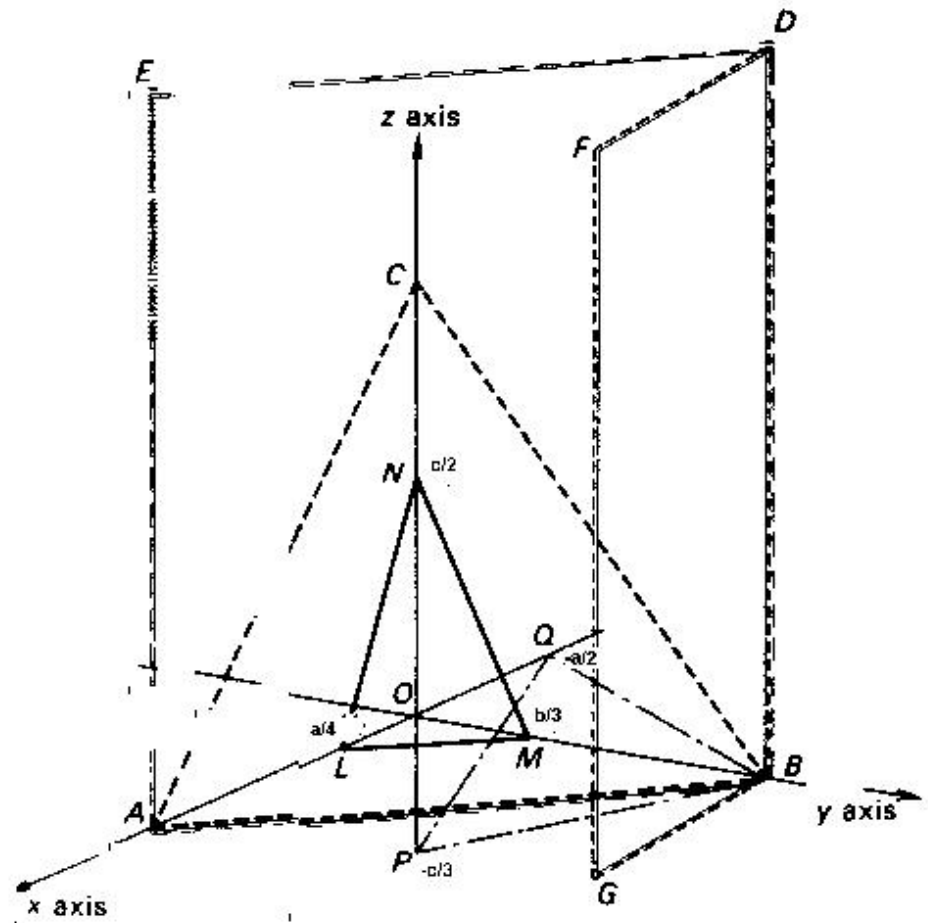
3) Επίπεδο ABDE (110)

4) Επίπεδο FDBG ($\bar{0}10$)

5) Επίπεδο QPB ($2\bar{1}3$)

Οι αριθμοί αυτοί
ονομάζονται

Δείκτες Miller



Miller Indices

Miller Indices are a symbolic vector representation for the orientation of an atomic plane in a crystal lattice and are defined as the reciprocals of the fractional intercepts which the plane makes with the crystallographic axes.

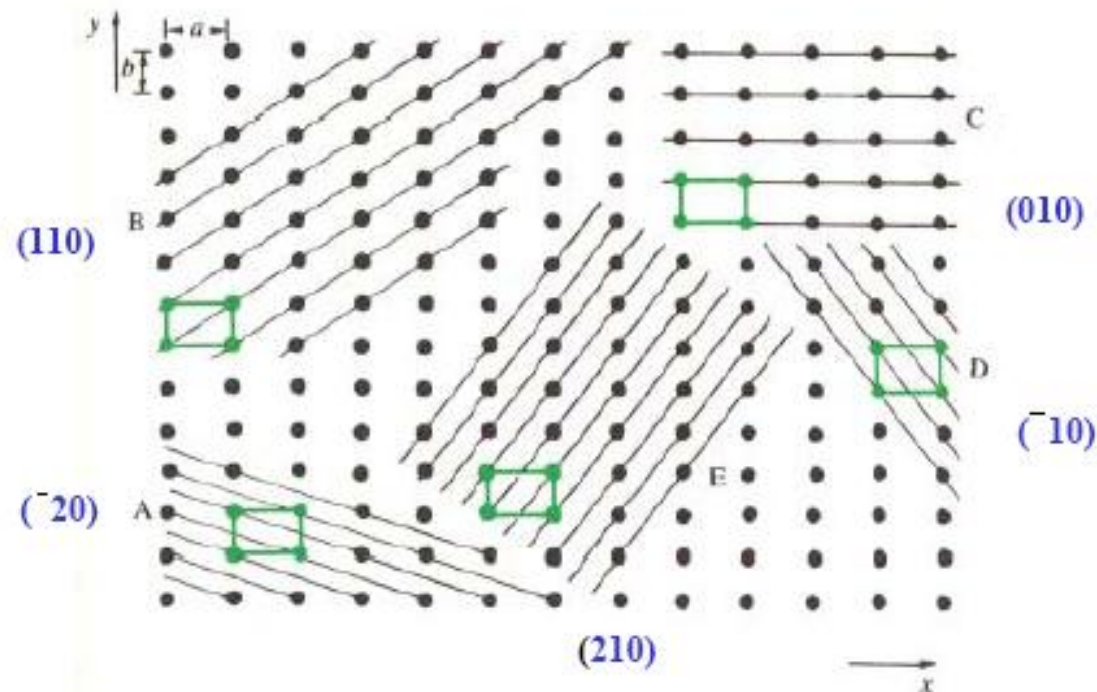
To determine Miller indices of a plane, take the following steps;

- 1) Determine the intercepts of the plane along each of the three crystallographic directions
- 2) Take the reciprocals of the intercepts
- 3) If fractions result, multiply each by the denominator of the smallest fraction

7.1.4 Crystal Planes and Miller Indices

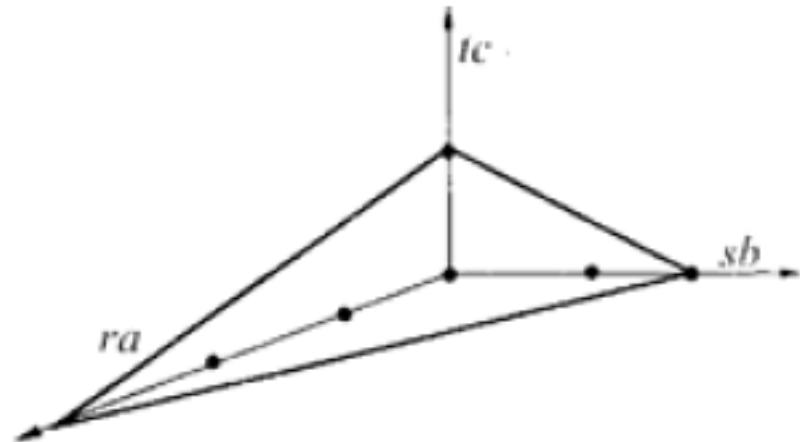
a. Lattice planes

It is possible to describe certain directions and planes with respect to the crystal lattice using a set of three integers referred to as **Miller Indices**. **Miller indices** describe the orientation and spacing of a family of planes.



b. Miller indices (hkl)

Miller indices are the reciprocal intercepts of the plane on the unit cell axes.



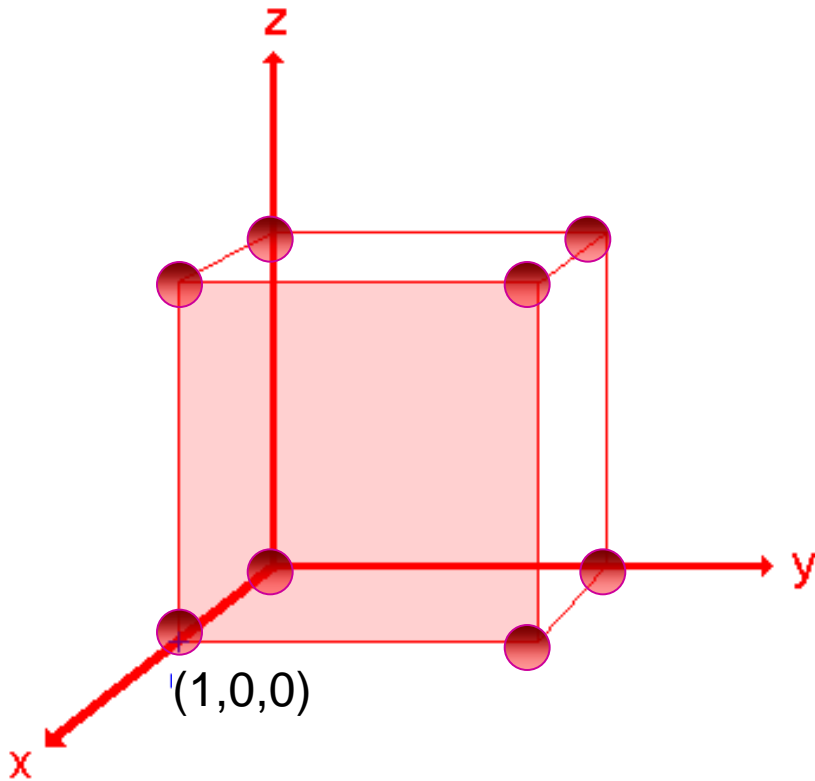
$$\frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t} = h : k : l$$

d. d-spacing formulae

The spacing between adjacent planes in a family is referred to as a “**d-spacing**”

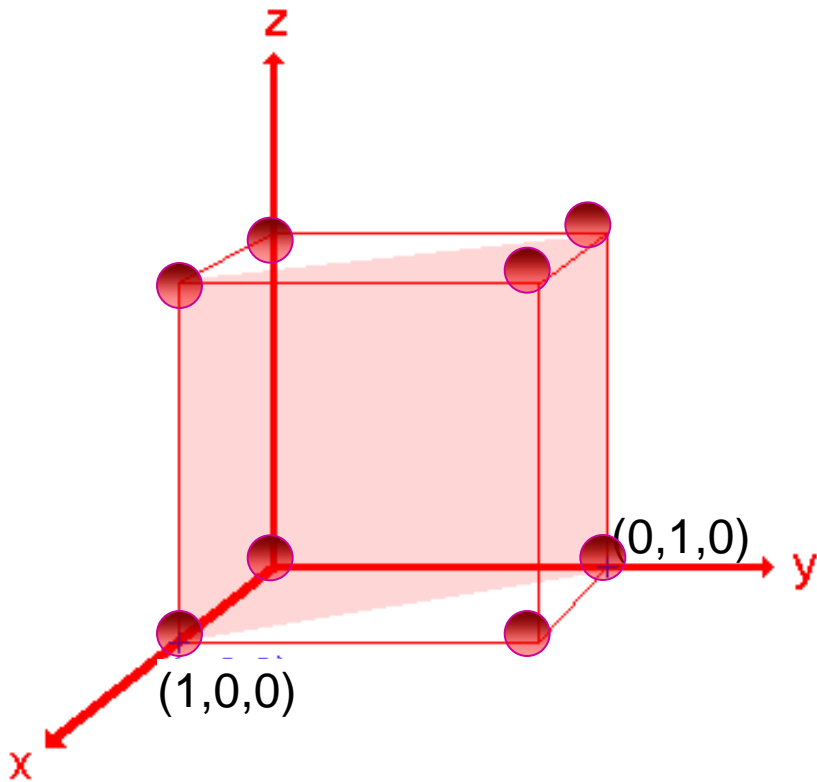
- **Cubic :** $1/d^2 = (h^2+k^2+l^2)/a^2$
- **Orthorhombic:** $1/d^2 = (h^2+k^2)/a^2 + l^2/c^2$
- **Tetragonal:** $1/d^2 = h^2/a^2+k^2/b^2 + l^2/c^2$
- **Hexagonal:** $1/d^2 = (4/3)(h^2+hk+k^2)/a^2 + l^2/c^2$
- **Monoclinic:** $1/d^2 = [(h/a)^2 + (k/b)^2 \sin^2\beta + (l/c)^2 - (2hl/ac)\cos\beta]/\sin^2\beta$
- **Triclinic:**

Example-1



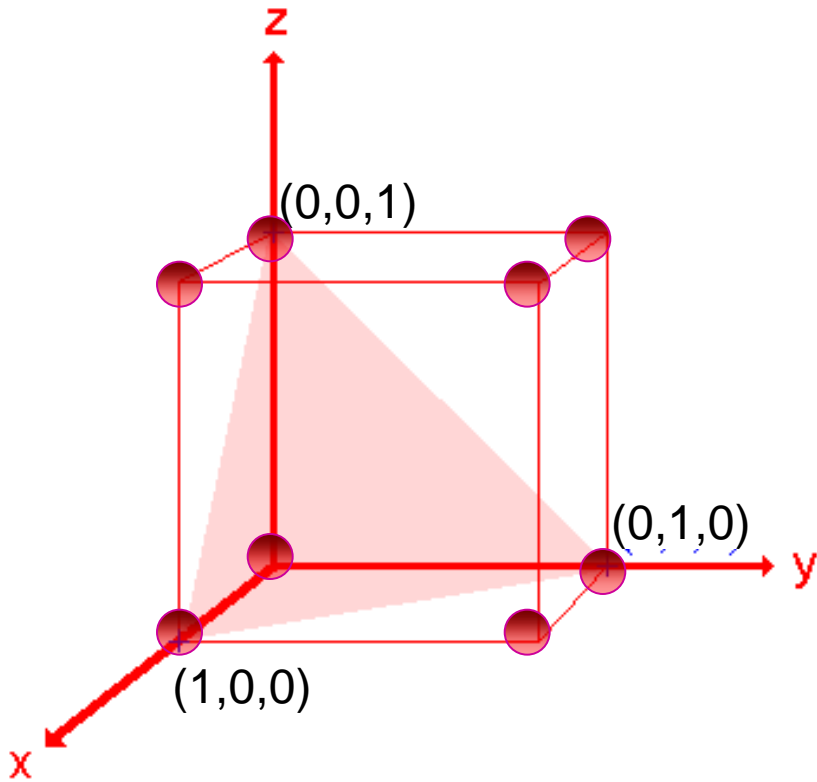
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	∞	∞
Reciprocals	1/1	1/ ∞	1/ ∞
Smallest Ratio	1	0	0
Miller Indices (100)			

Example-2



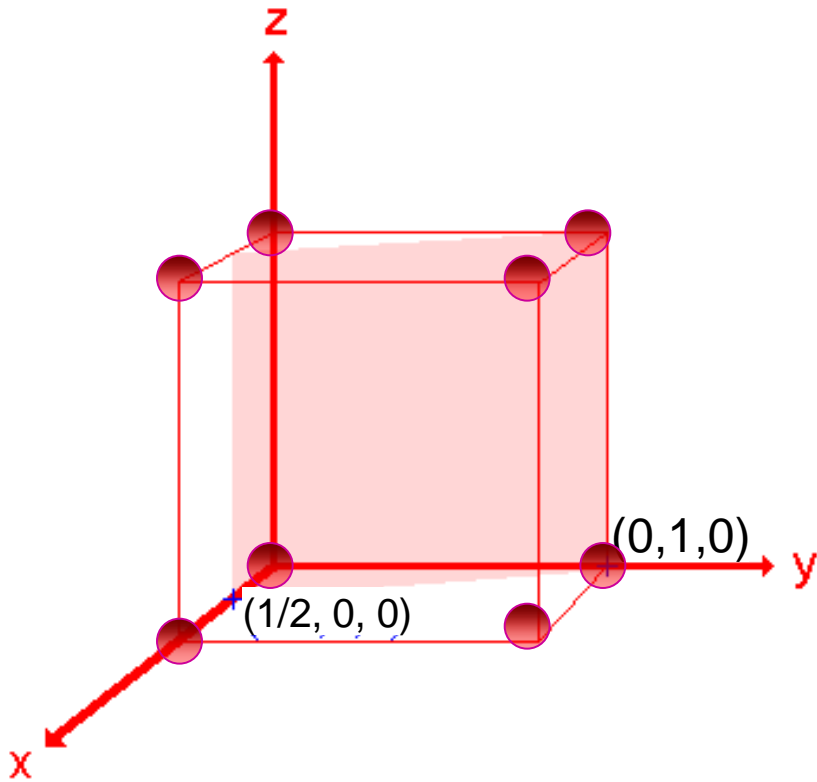
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	1	∞
Reciprocals	1/1	1/1	1/ ∞
Smallest Ratio	1	1	0
Miller Indices (110)			

Example-3



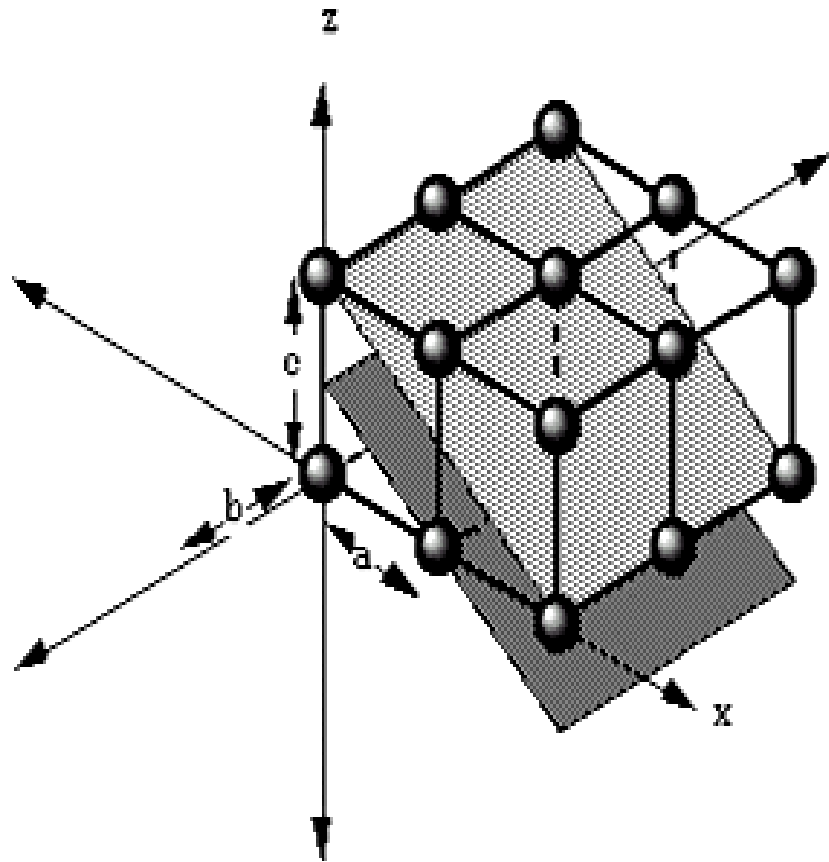
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	1	1
Reciprocals	1/1	1/1	1/1
Smallest Ratio	1	1	1
Miller indices (111)			

Example-4



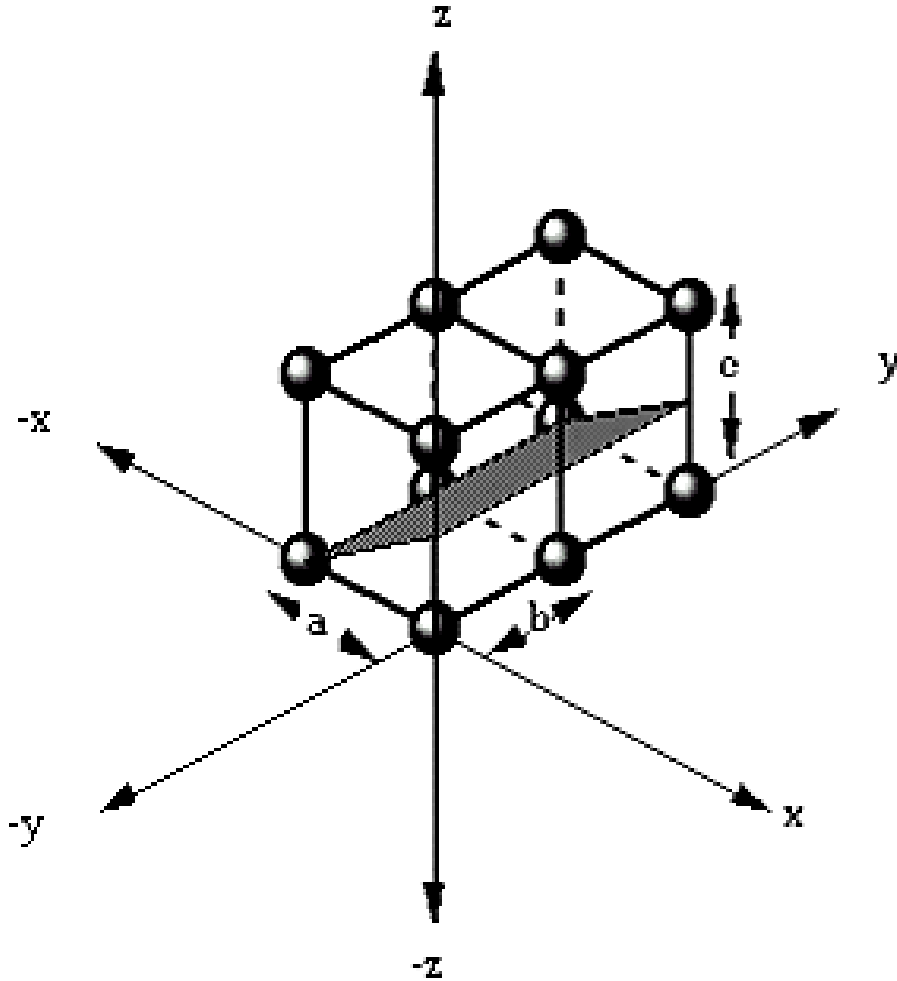
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1/2	1	∞
Reciprocals	1/(1/2)	1/1	1/ ∞
Smallest Ratio	2	1	0
Miller indices (210)			

Example-5



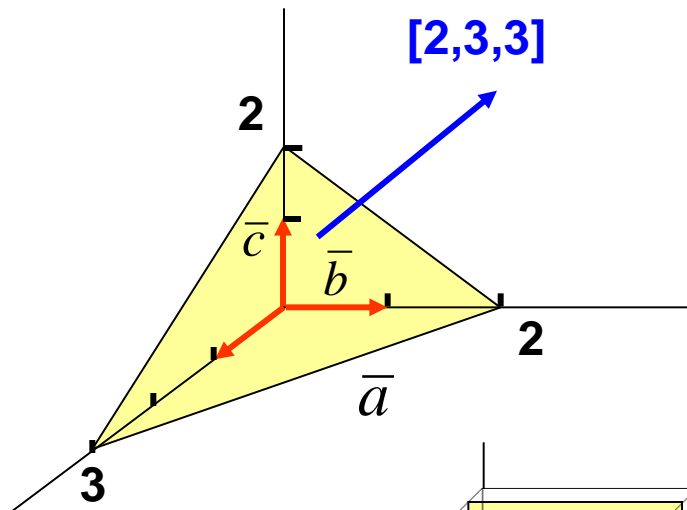
Axis	a	b	c
Intercept points	1	∞	$\frac{1}{2}$
Reciprocals	1/1	1/ ∞	1/($\frac{1}{2}$)
Smallest Ratio	1	0	2
Miller Indices (102)			

Example-6



Axis	a	b	c
Intercept points	-1	∞	$1/2$
Reciprocals	$1/-1$	$1/\infty$	$1/(1/2)$
Smallest Ratio	-1	0	2
Miller indices	$(\bar{1}02)$		

Miller Indices

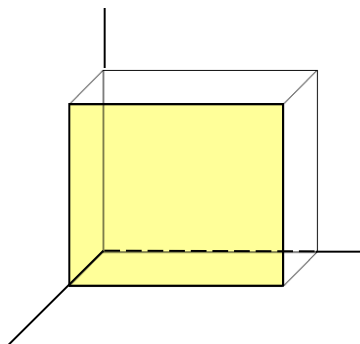


Plane intercepts axes at $3\bar{a}$, $2\bar{b}$, $2\bar{c}$

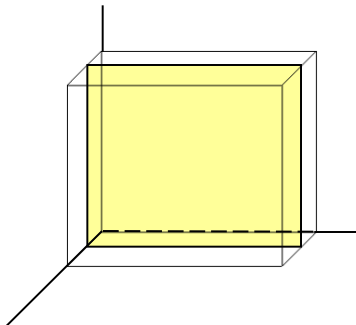
Reciprocal numbers are: $\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Indices of the plane (Miller): **(2,3,3)**

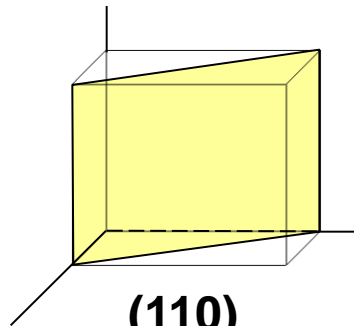
Indices of the direction: **[2,3,3]**



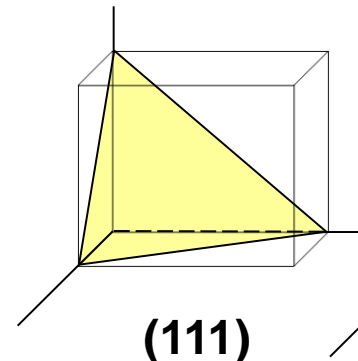
(100)



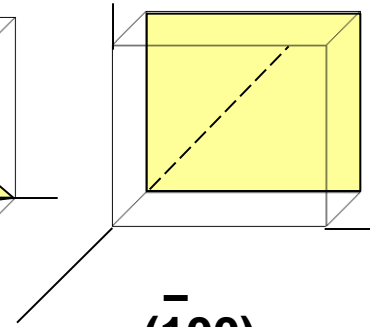
(200)



(110)

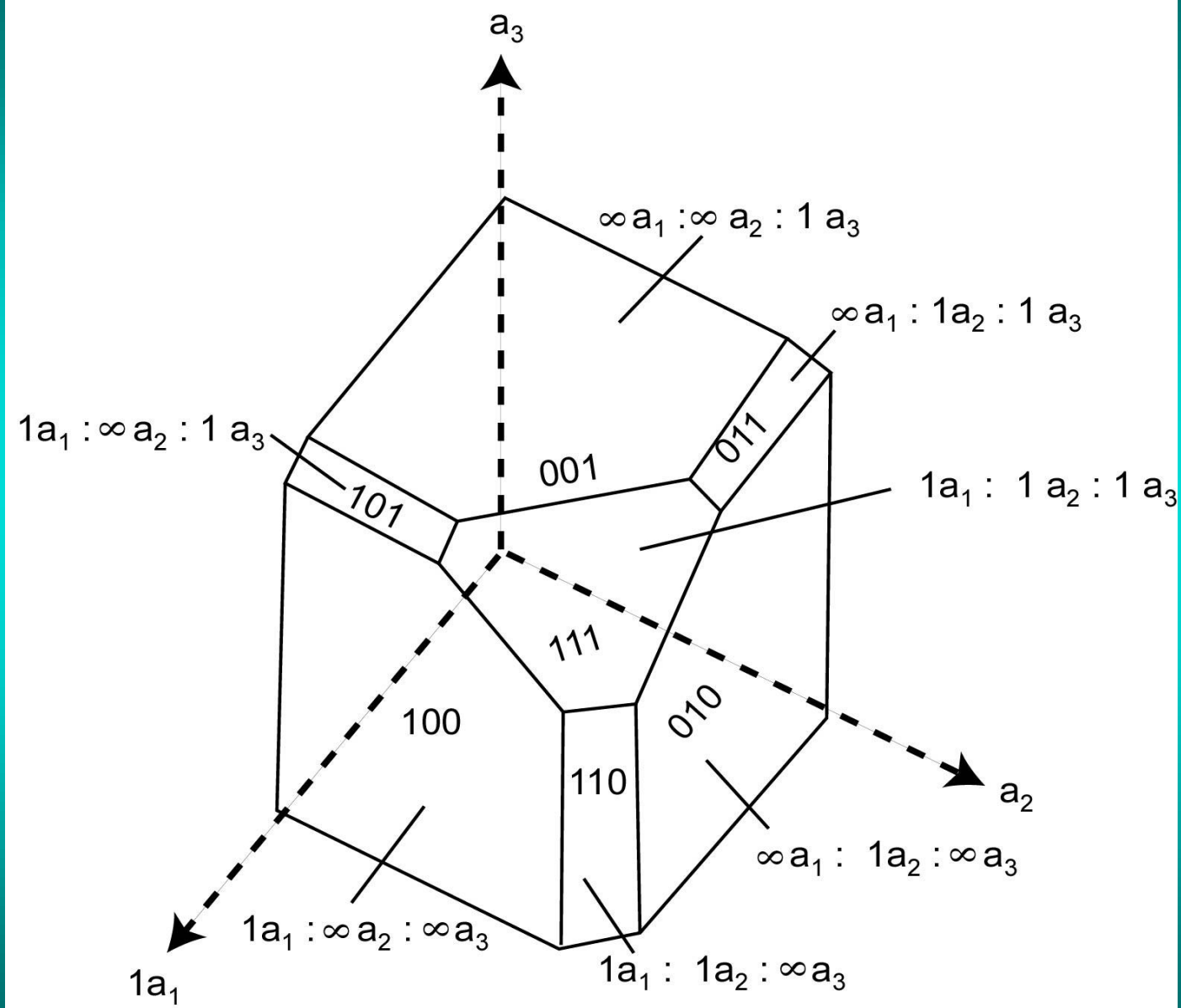


(111)

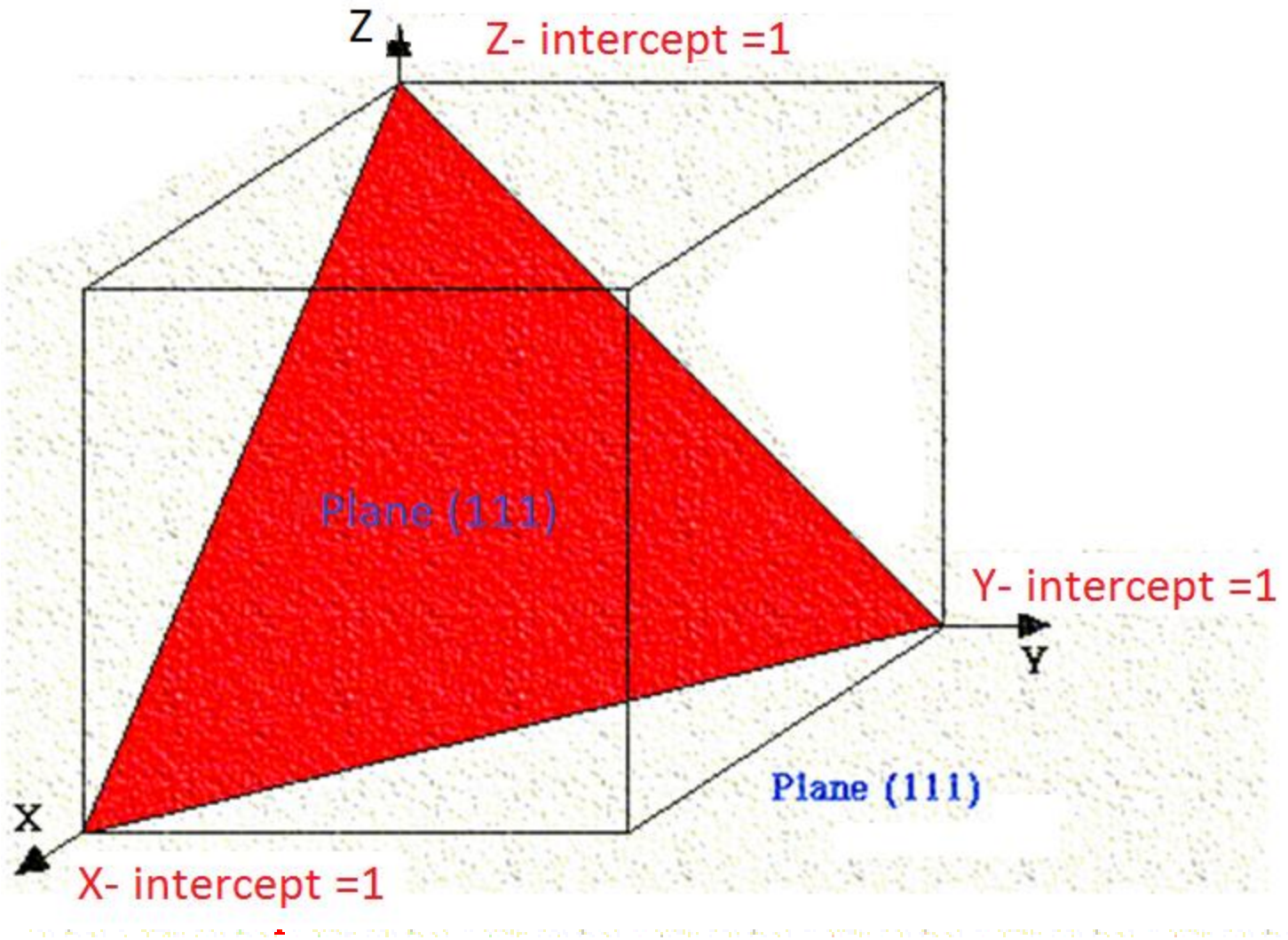


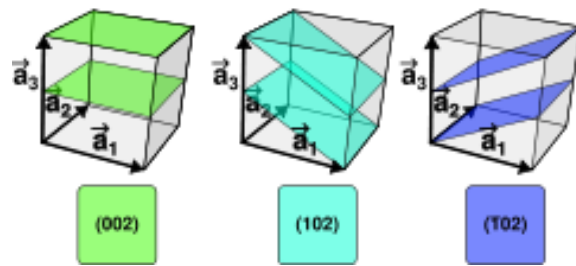
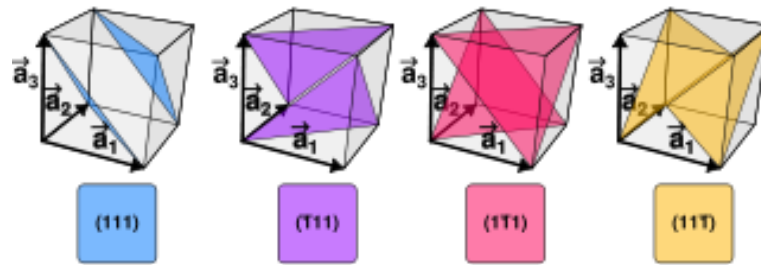
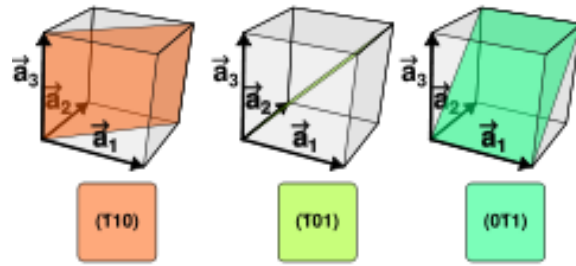
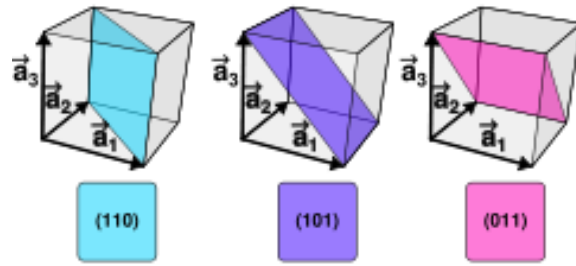
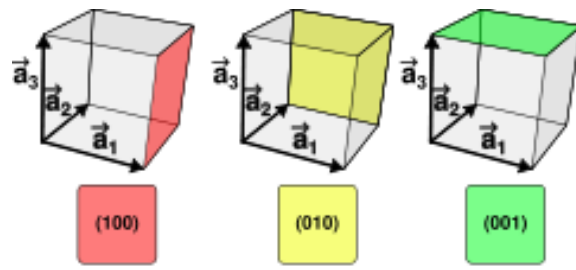
($\bar{1}$ 00)

Miller indices and intercepts

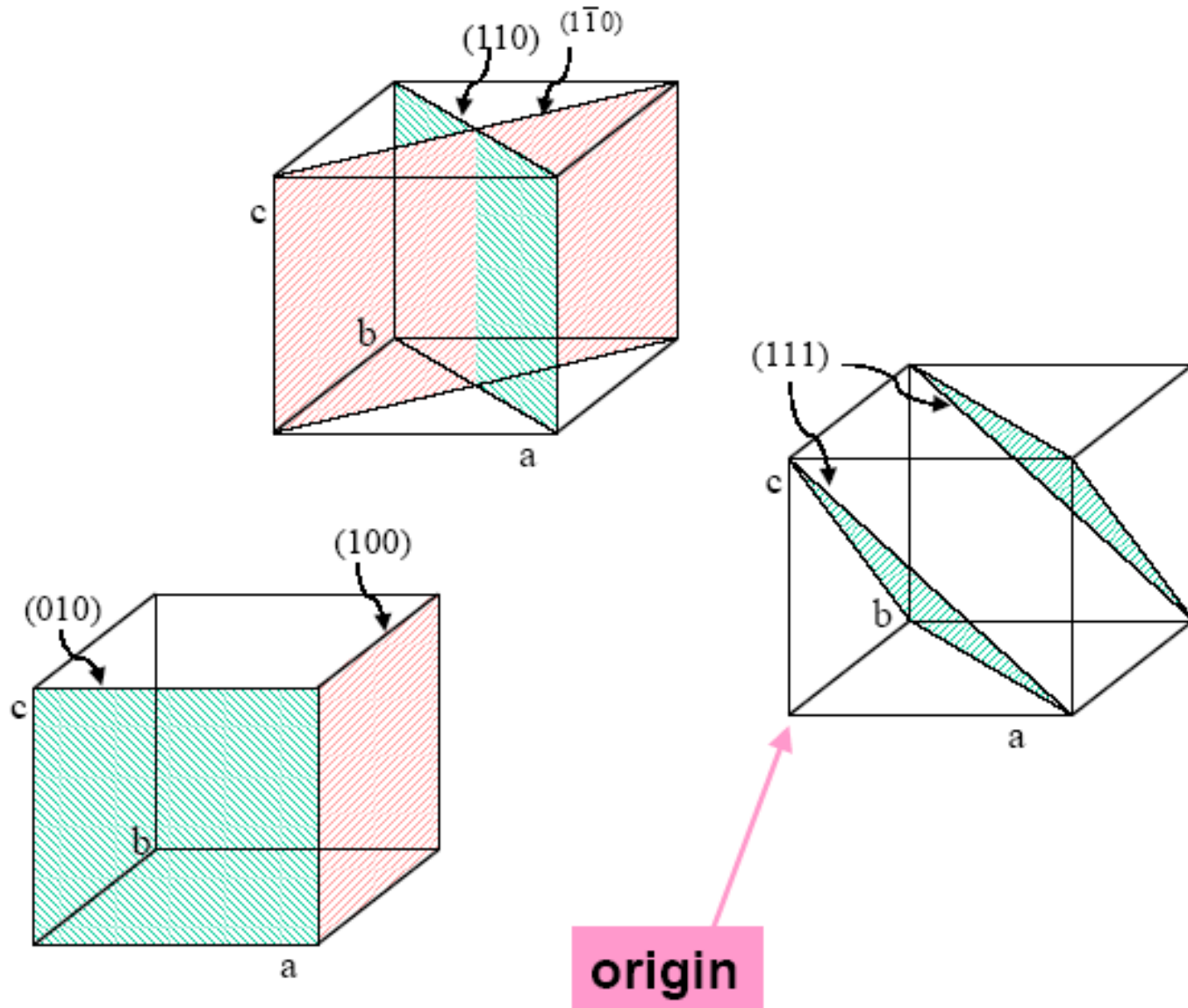


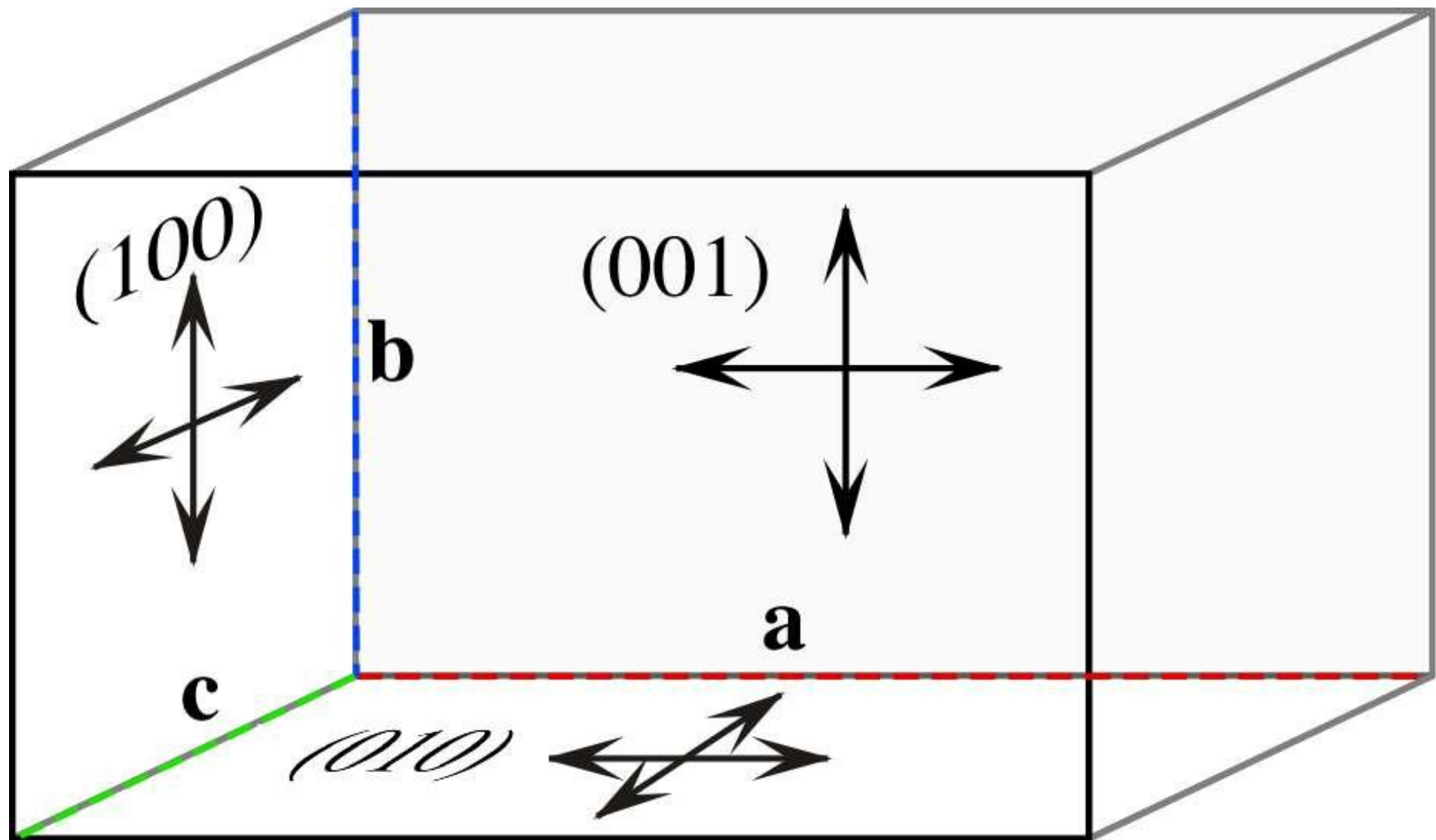
Example-7





Examples of Miller indices

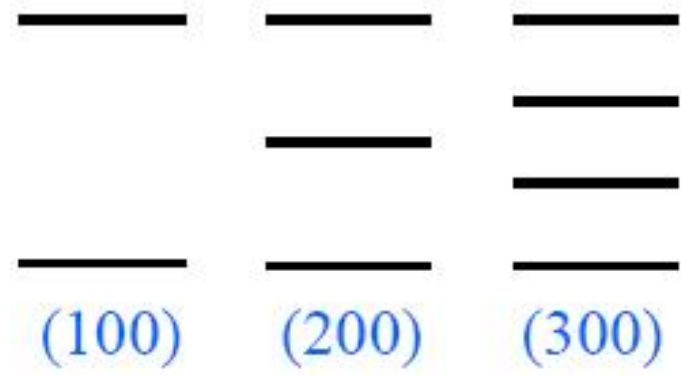




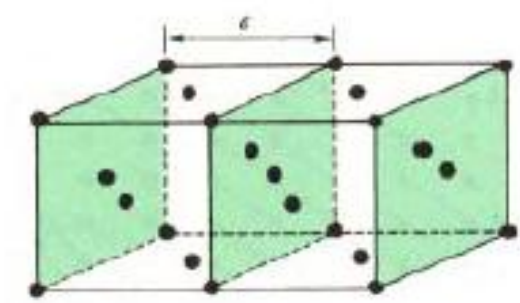
diffraction
crystal planes -
(100), (200), ...

Families of planes

Lattice plane
directions-(100)

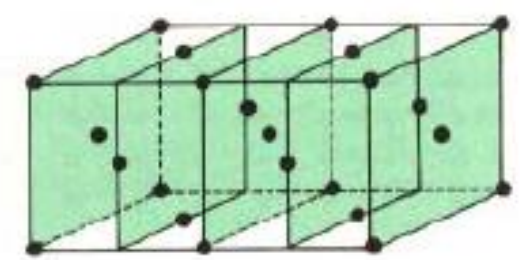


(100)

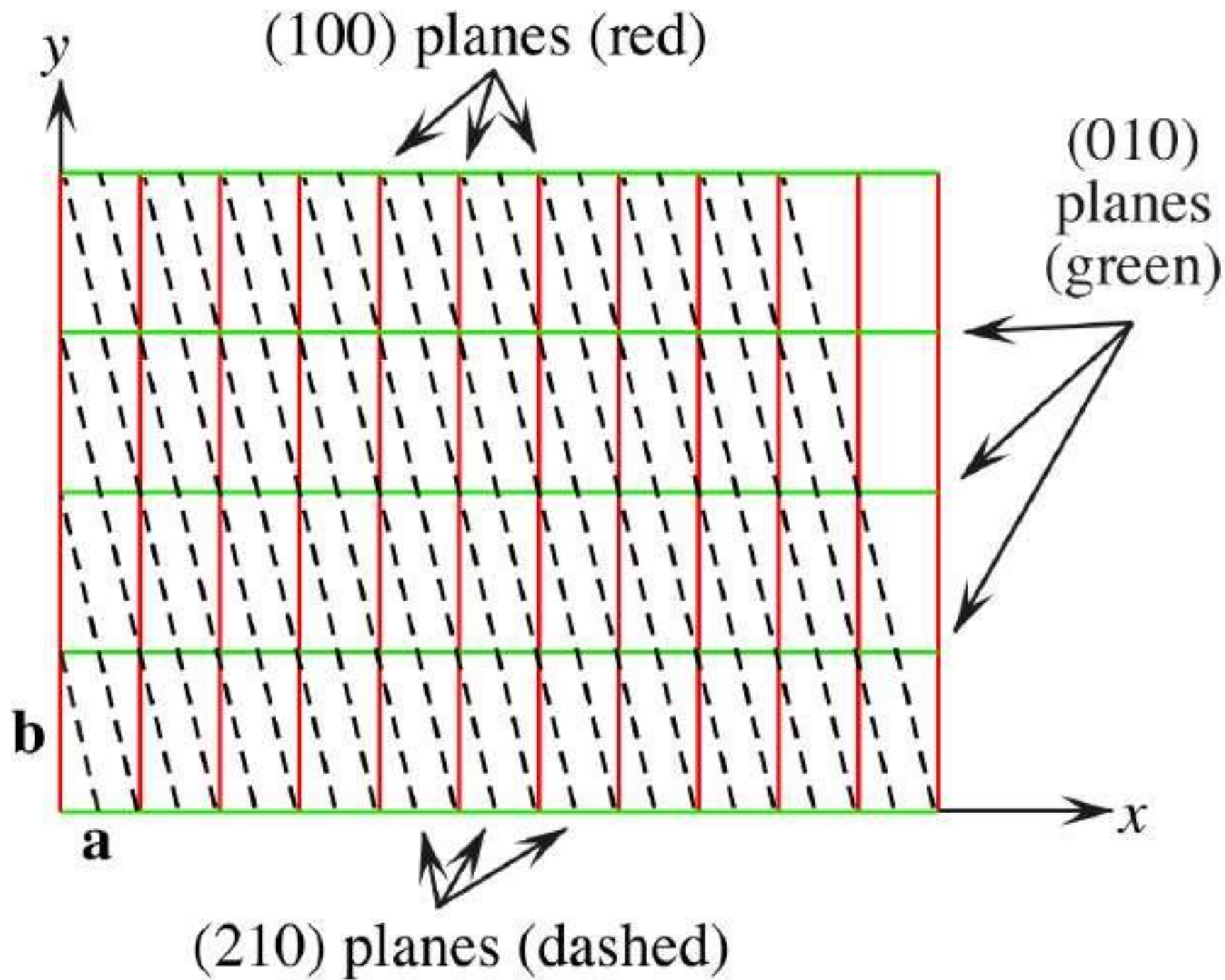


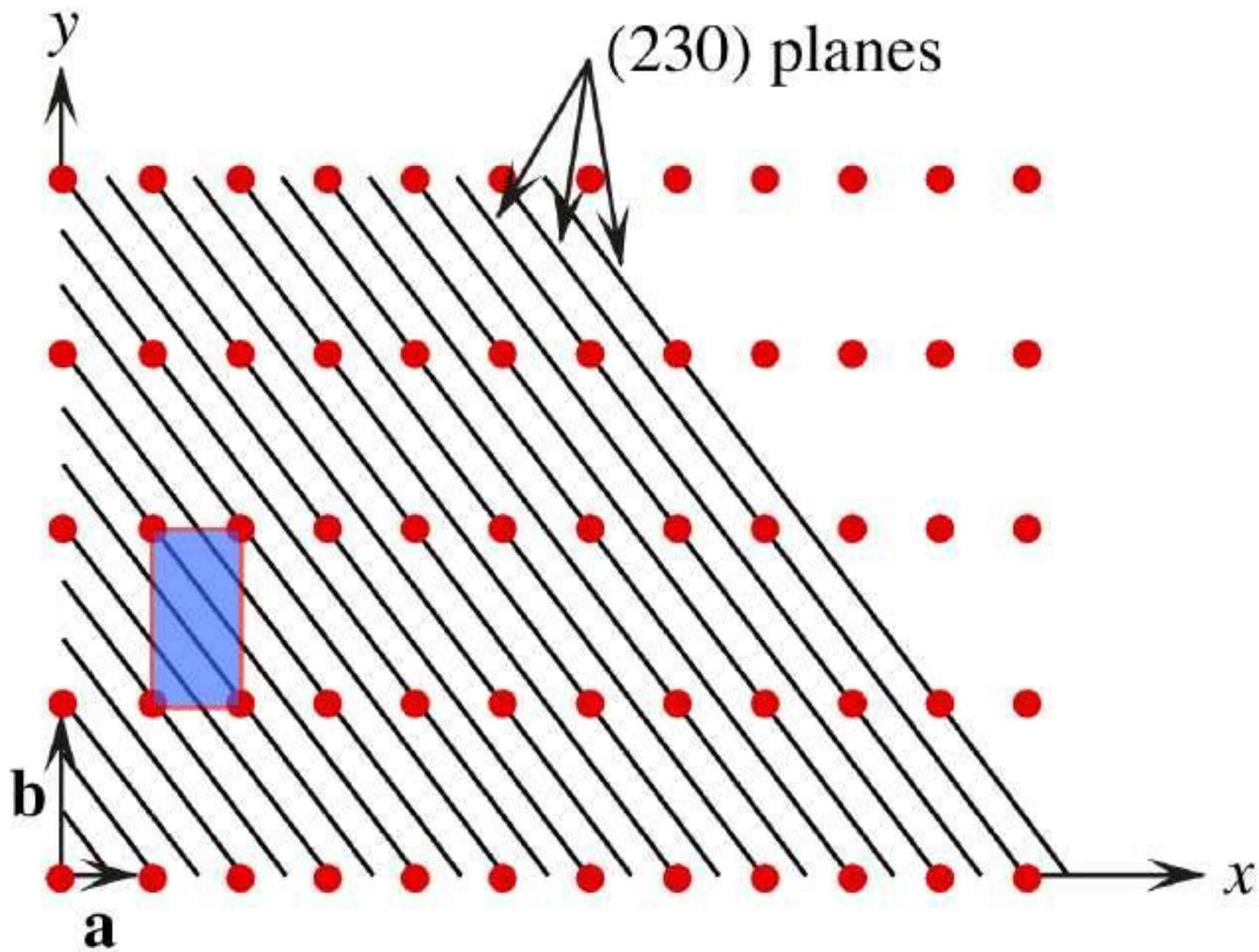
(a)

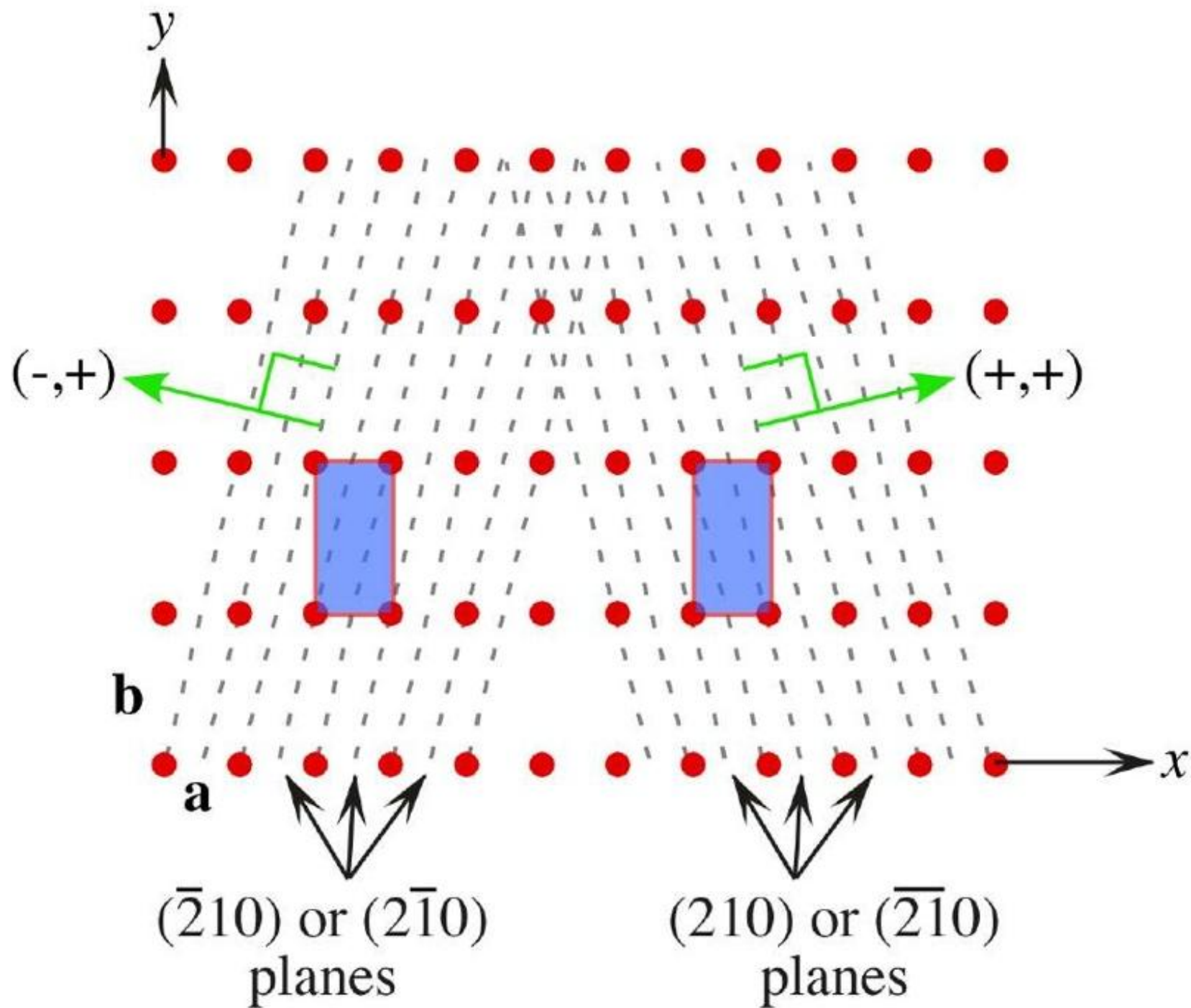
(200)



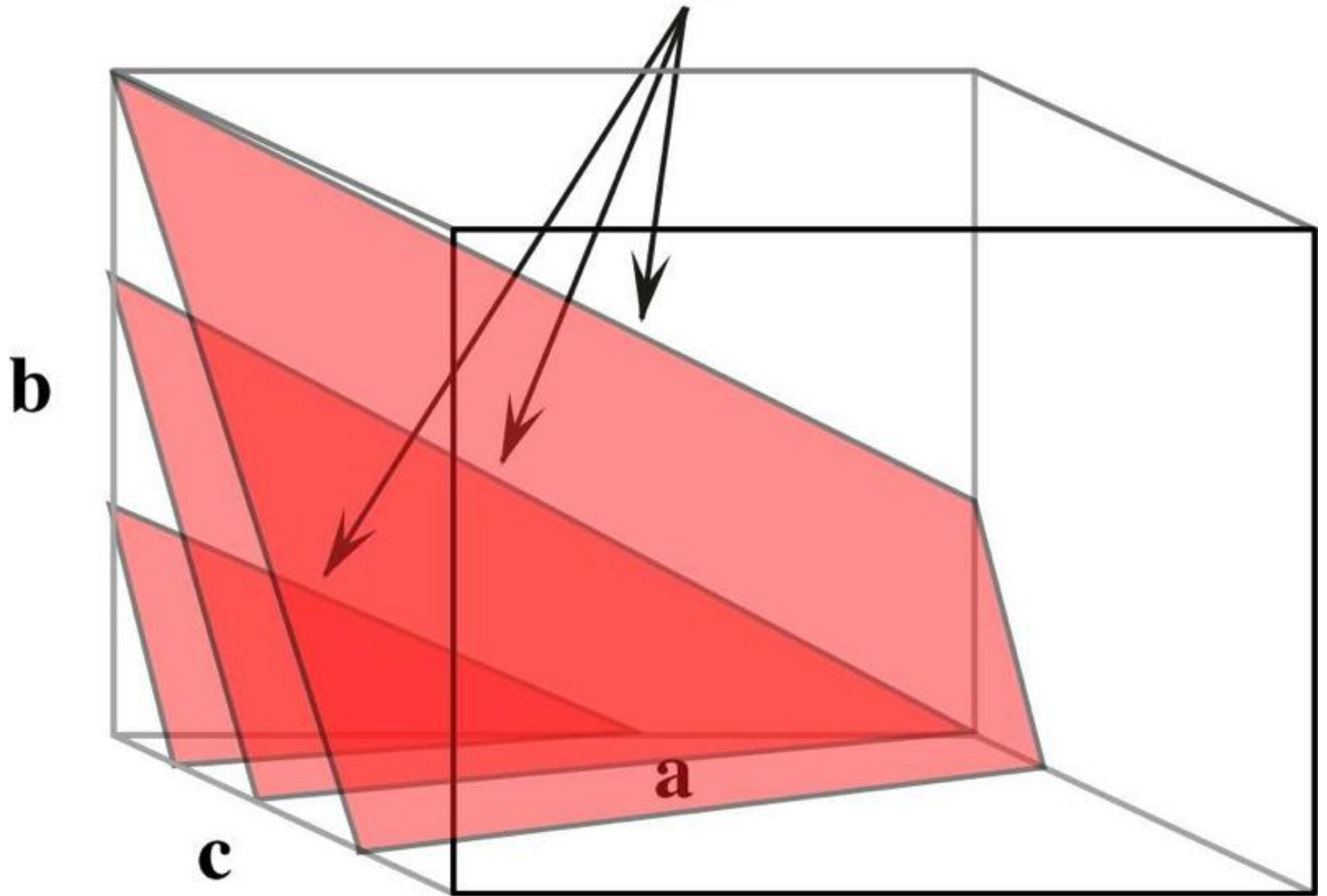
(b)







(234) planes



Miller indices (hkl) are used specify the orientation and spacing of a family of planes.

{hkl} are used to specify all symmetry equivalent sets of planes

Miller indices [hkl] are used to specify a direction in space with respect of the unit cell axes.

<hkl> are used to specify a set of symmetry equivalent directions.

[hkl] zone axis

Indices of a Family or Form

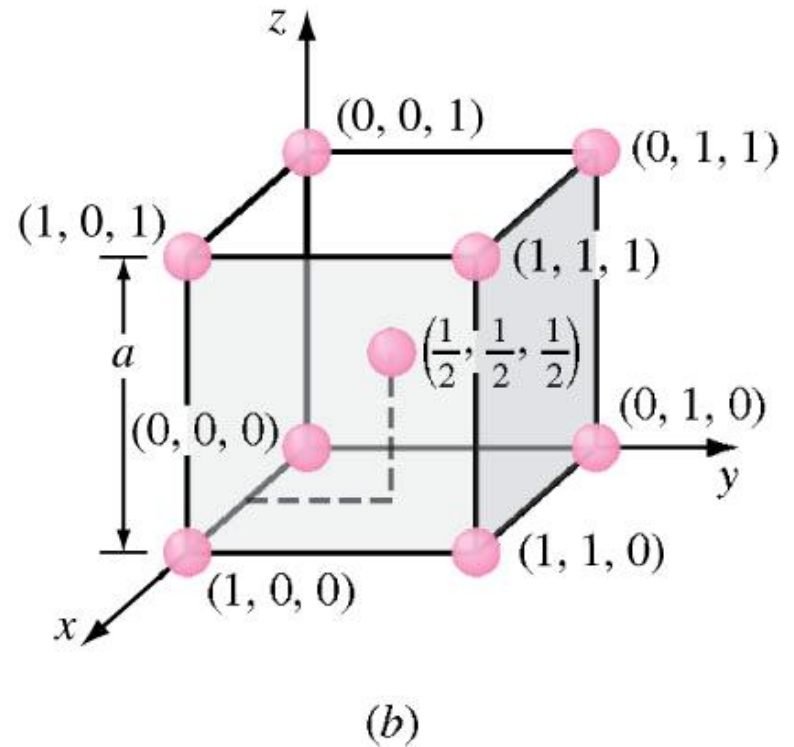
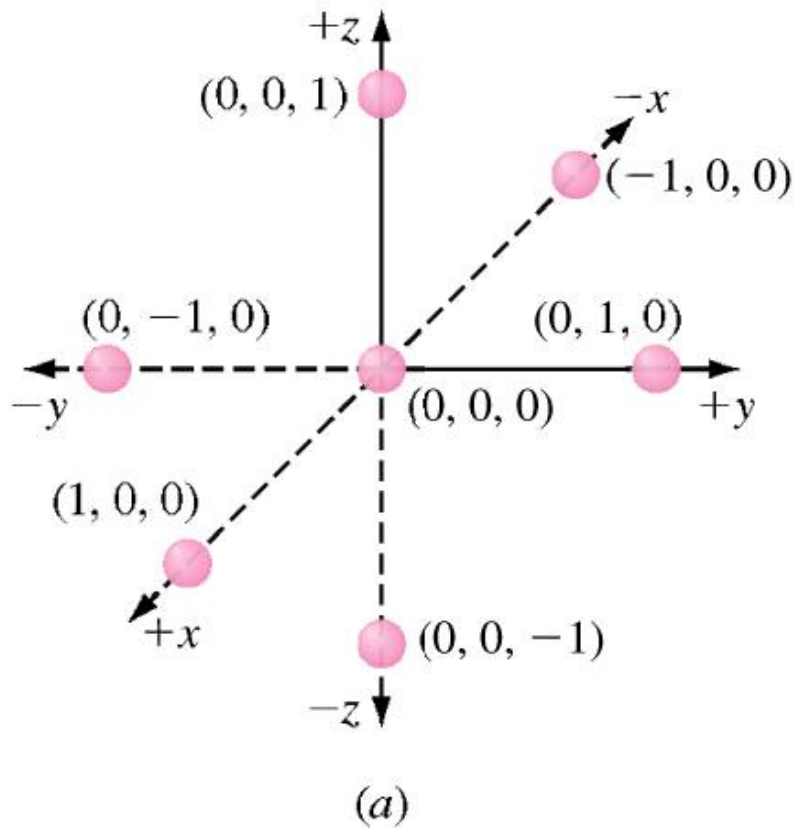
- Sometimes when the unit cell has rotational symmetry, several nonparallel planes may be equivalent by virtue of this symmetry, in which case it is convenient to lump all these planes in the same Miller Indices, but with curly brackets.

$$\{100\} \equiv (100), (010), (001), (0\bar{1}0), (00\bar{1}), (\bar{1}00)$$

$$\{111\} \equiv (111), (11\bar{1}), (1\bar{1}1), (\bar{1}11), (\bar{1}\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), (\bar{1}1\bar{1}), (1\bar{1}\bar{1})$$

Thus indices $\{h,k,l\}$ represent all the planes equivalent to the plane (hkl) through rotational symmetry.

Lattice Sites in Cubic Unit Cell



Crystal Directions

- We choose one lattice point on the line as an origin, say the point O. Choice of origin is completely arbitrary, since every lattice point is identical.
- Then we choose the lattice vector joining O to any point on the line, say point T. This vector can be written as;

$$R = n_1 a + n_2 b + n_3 c$$

- To distinguish a lattice direction from a lattice point, the triple is enclosed in square brackets [...] is used. $[n_1 n_2 n_3]$
- $[n_1 n_2 n_3]$ is the smallest integer of the same relative ratios.

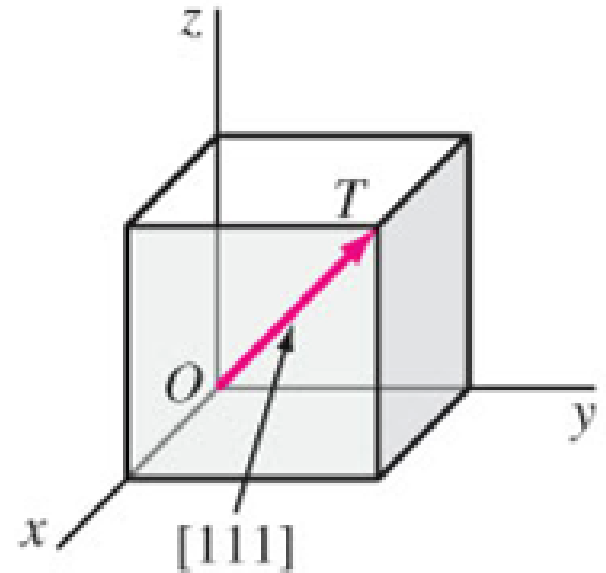
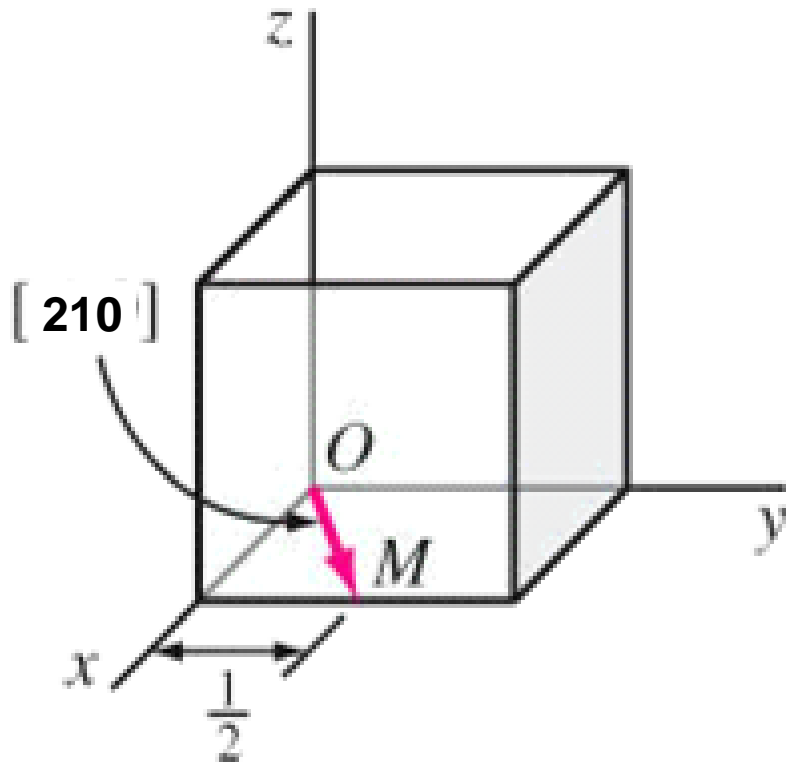


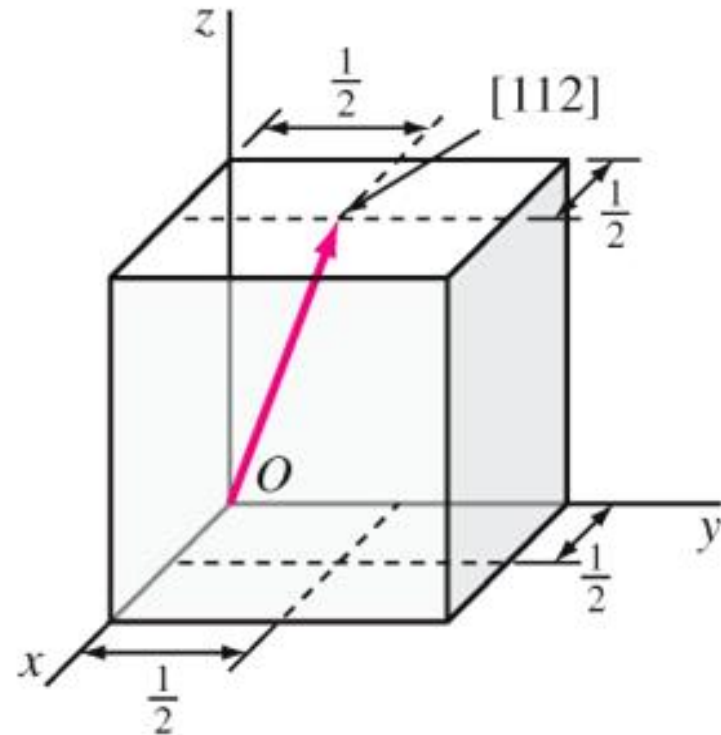
Fig. Shows
[111] direction

Examples



$$X = 1, Y = \frac{1}{2}, Z = 0$$

$$[1 \frac{1}{2} 0] \rightarrow [\bar{2} 1 0]$$



$$X = \frac{1}{2}, Y = \frac{1}{2}, Z = 1$$

$$[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1] \rightarrow [1 1 2]$$

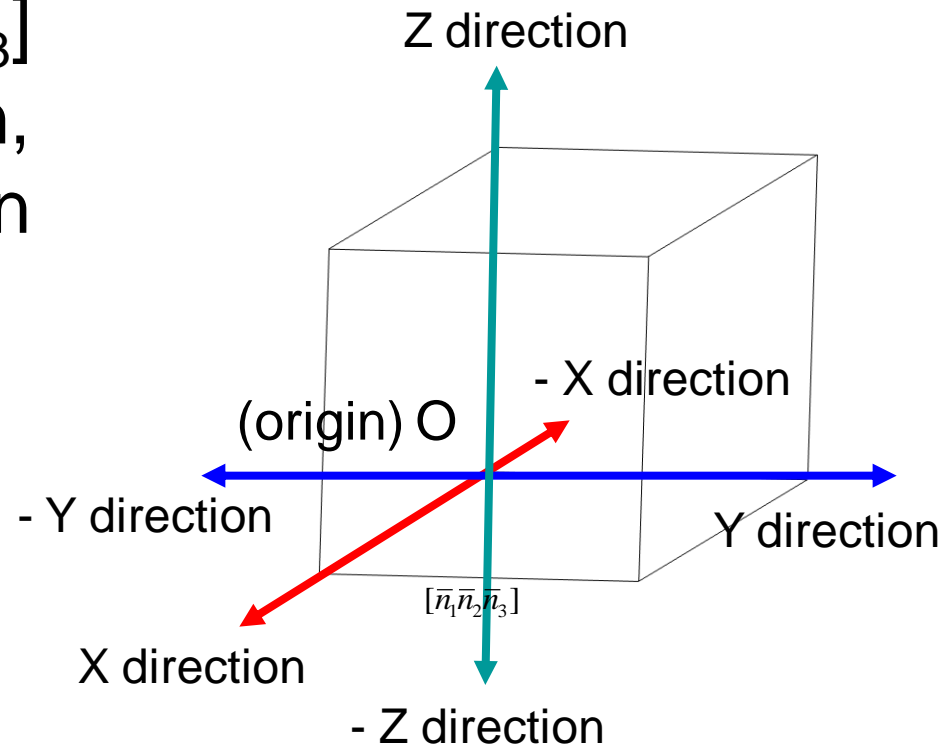
Negative directions

- When we write the direction $[n_1 n_2 n_3]$ depend on the origin, negative directions can be written as

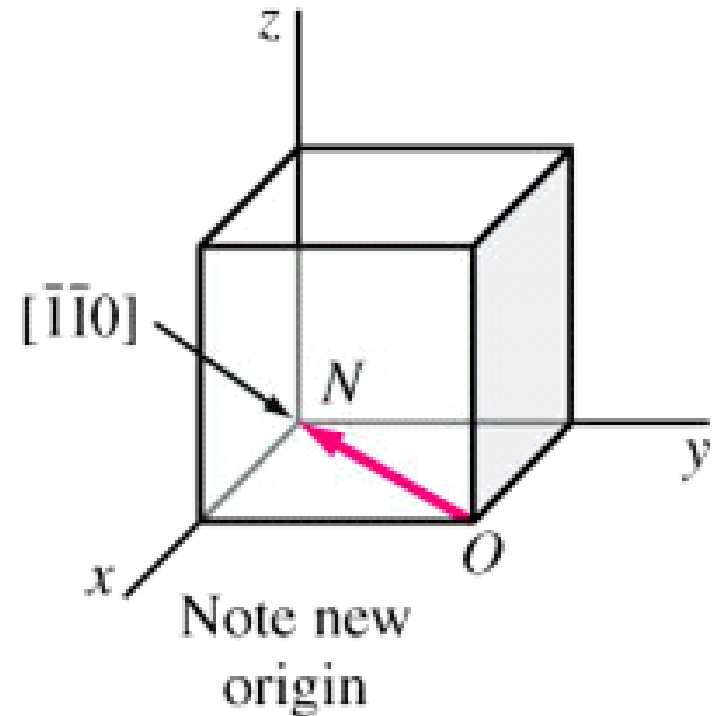
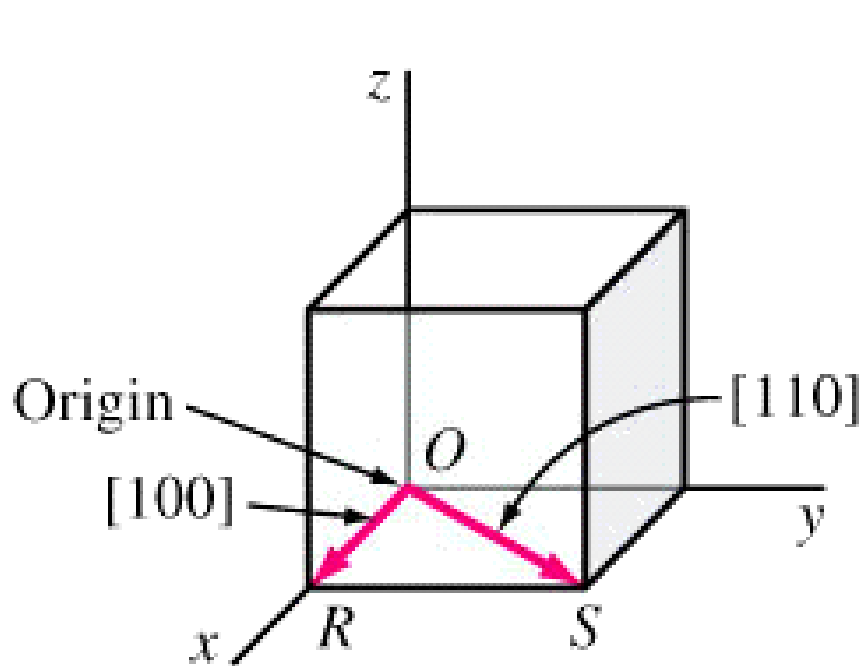
$$[\bar{n}_1 \bar{n}_2 \bar{n}_3]$$

- $R = n_1 a + n_2 b + n_3 c$

Direction must be smallest integers.



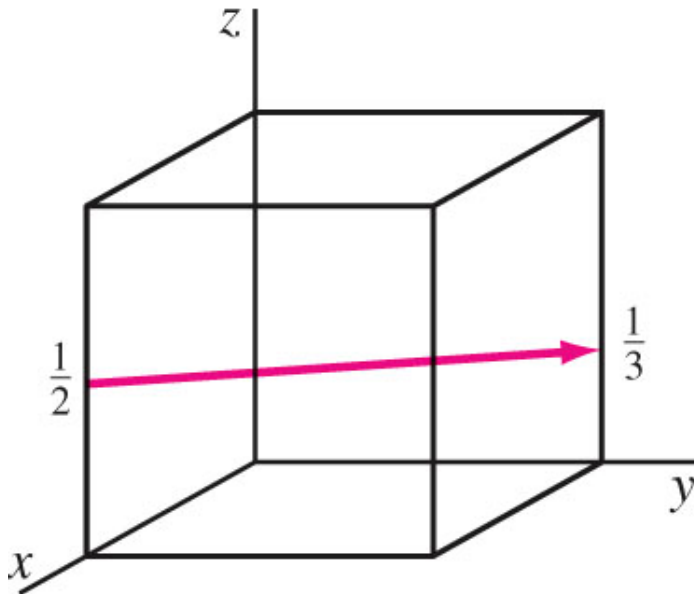
Examples of crystal directions



$$X = 1, Y = 0, Z = 0 \rightarrow [1\ 0\ 0]$$

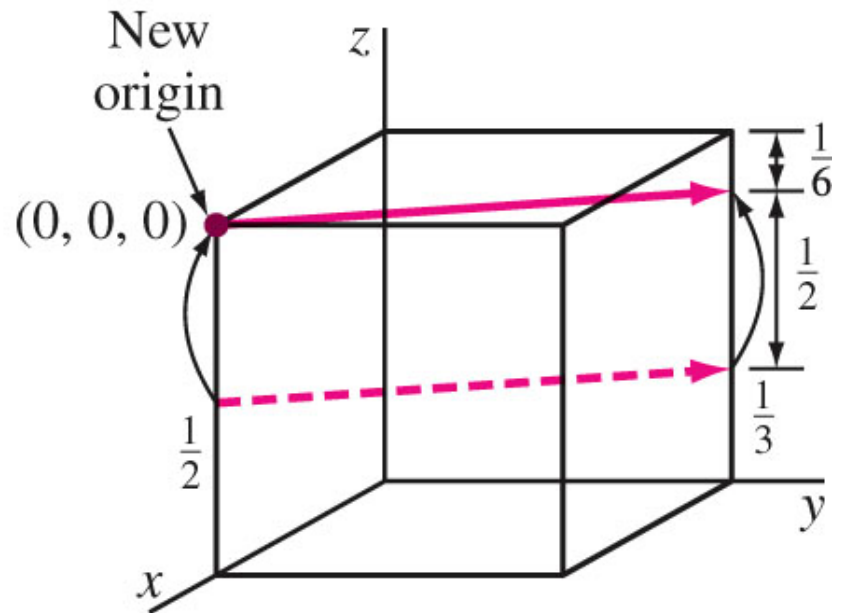
$$X = -1, Y = -1, Z = 0 \rightarrow [\bar{1}\bar{1}0]$$

Examples



(a)

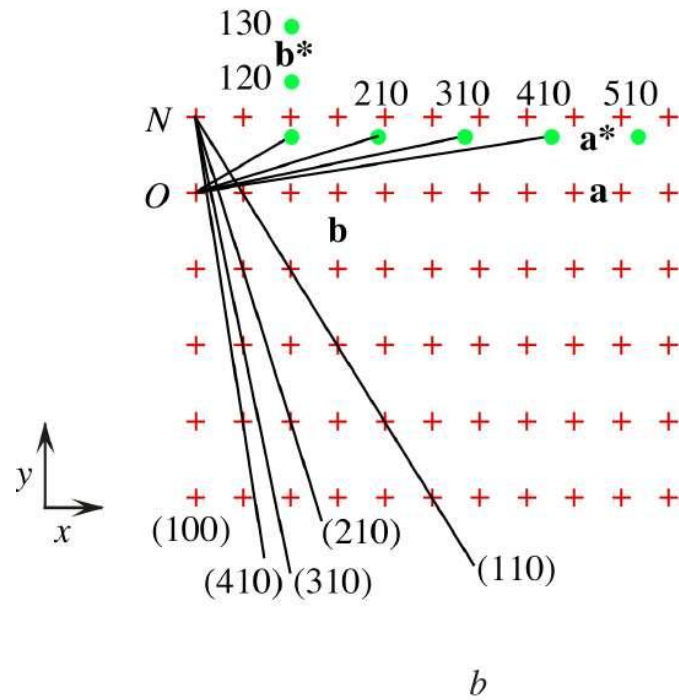
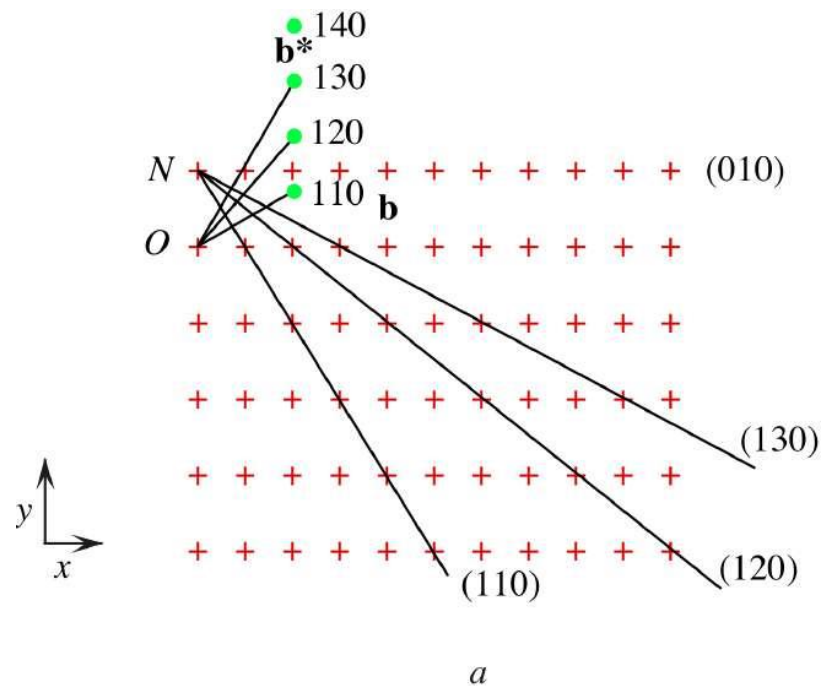
We can move vector to the origin.



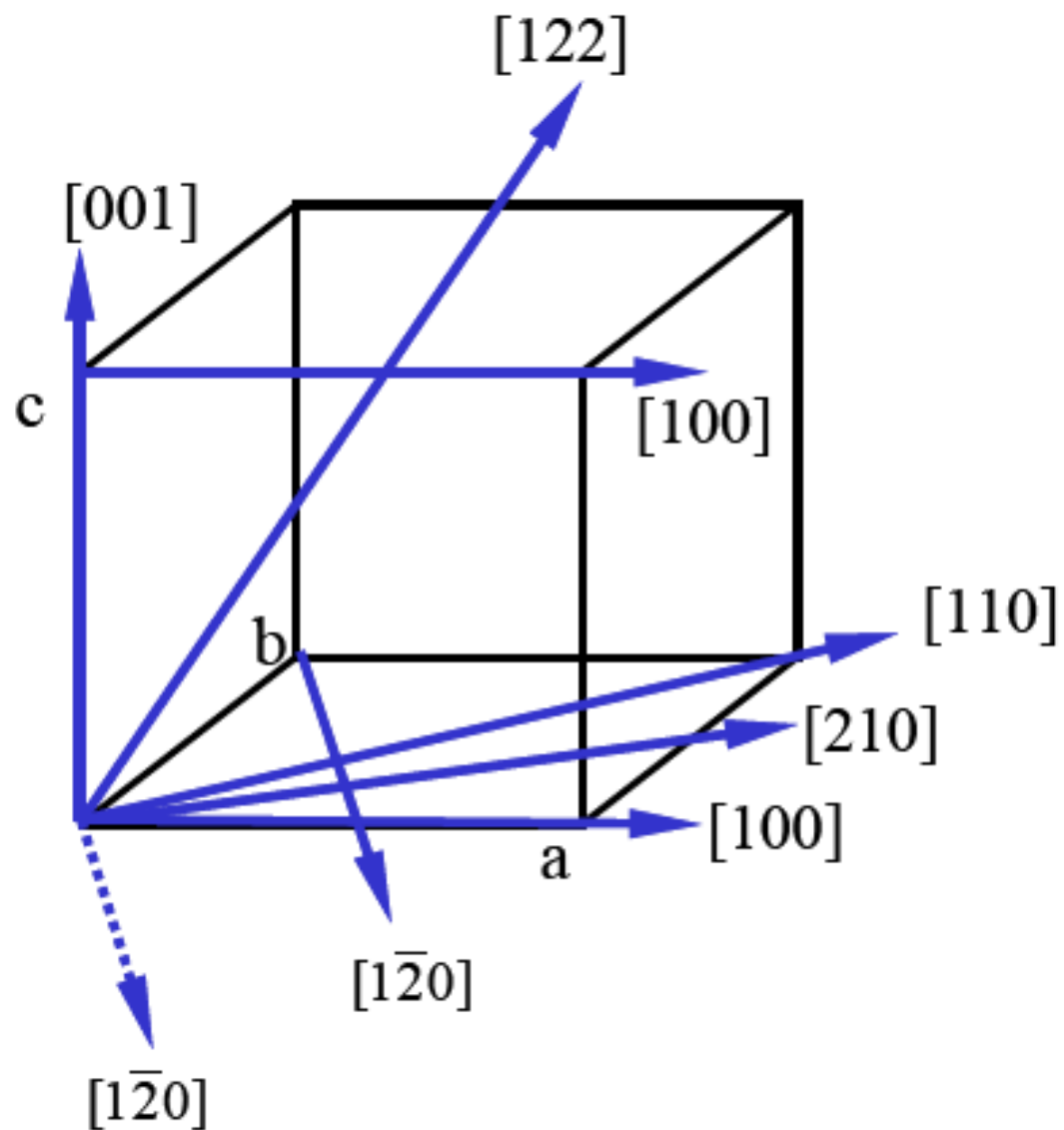
(b)

$$X = -1 \quad , \quad Y = 1 \quad , \quad Z = -1/6$$

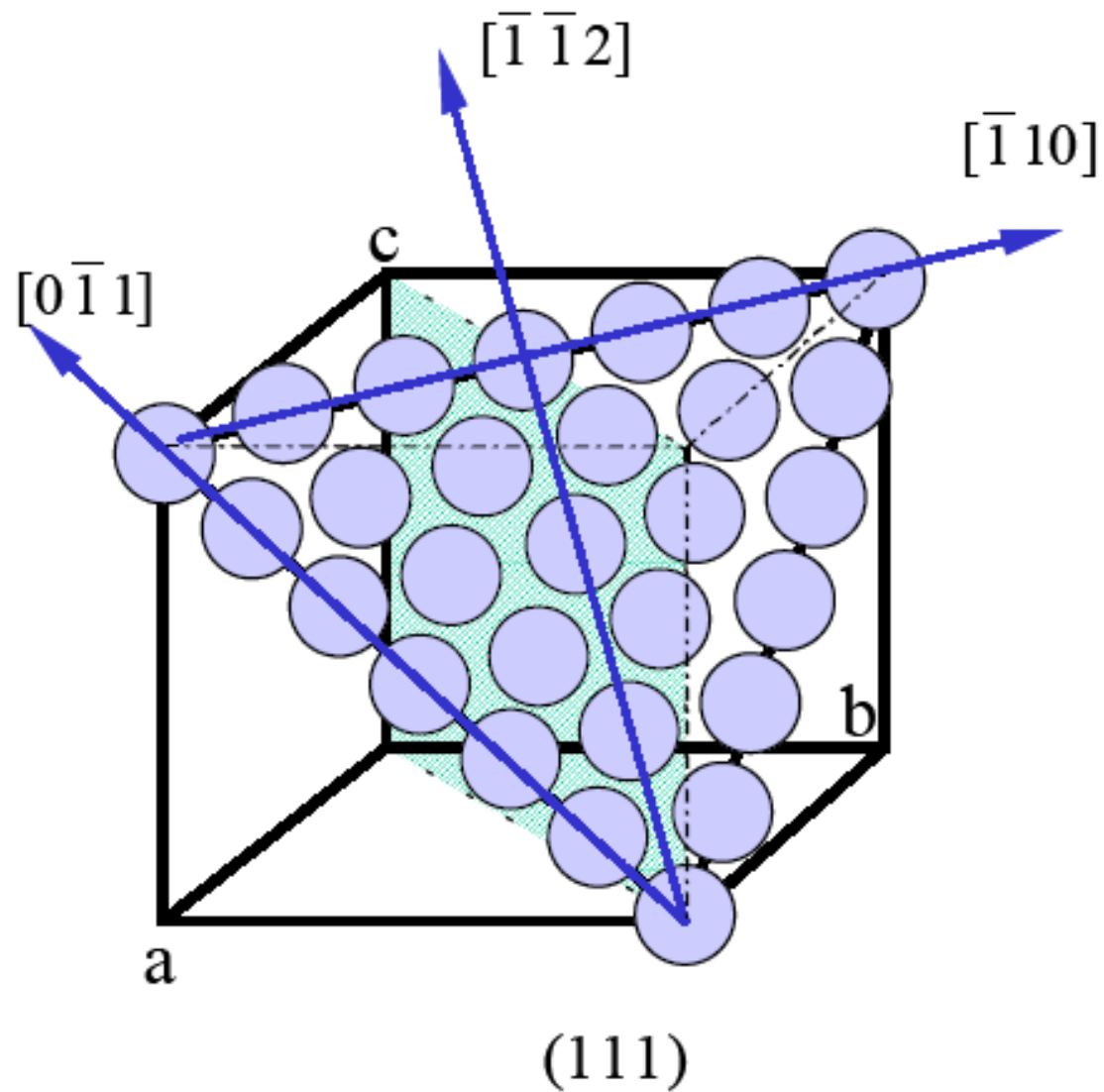
$$[-1 \ 1 \ -1/6] \quad \rightarrow \quad [\bar{6} \ \bar{6} \ \bar{1}]$$



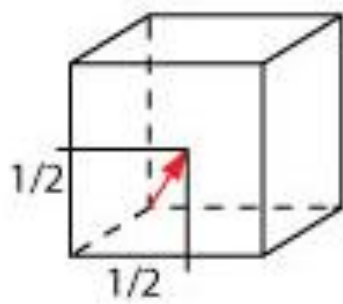
C. Directions in lattice



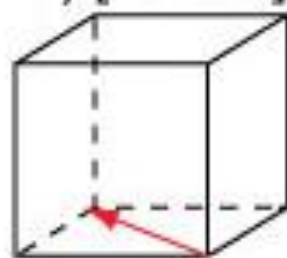
Example: Directions on the (111) plane.



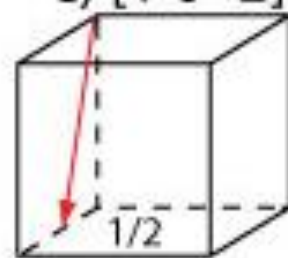
a) $[2\ 1\ 1]$



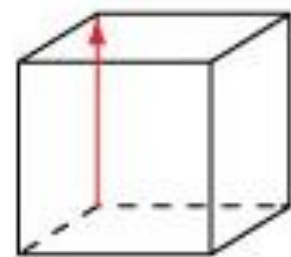
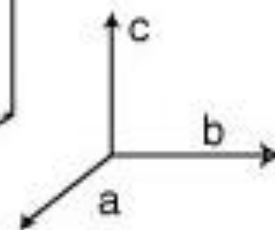
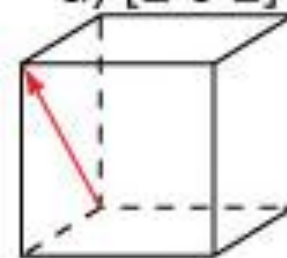
b) $[-1\ -1\ 0]$



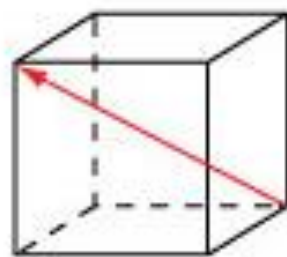
c) $[1\ 0\ -2]$



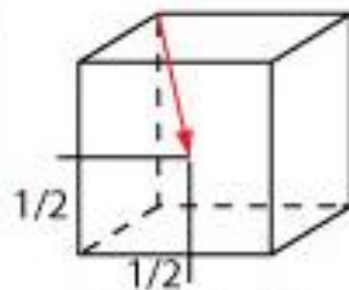
d) $[2\ 0\ 2]$



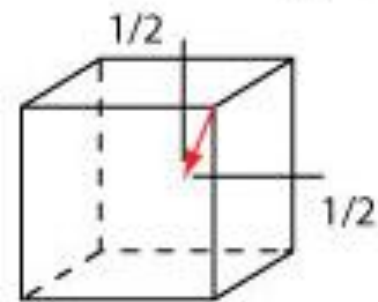
e) $[0\ 0\ 4]$



f) $[1\ -1\ 1]$

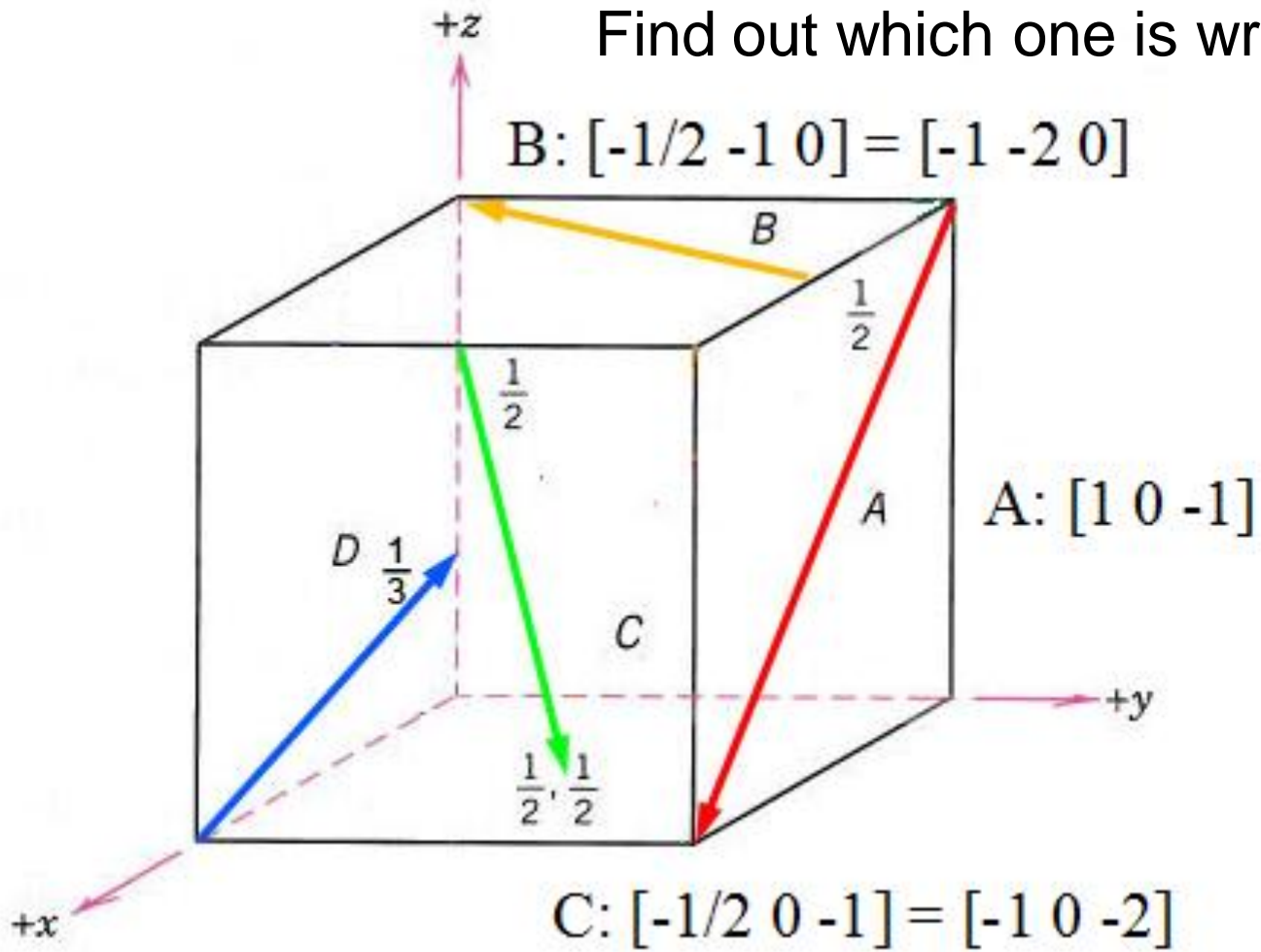


g) $[2\ 1\ -1]$



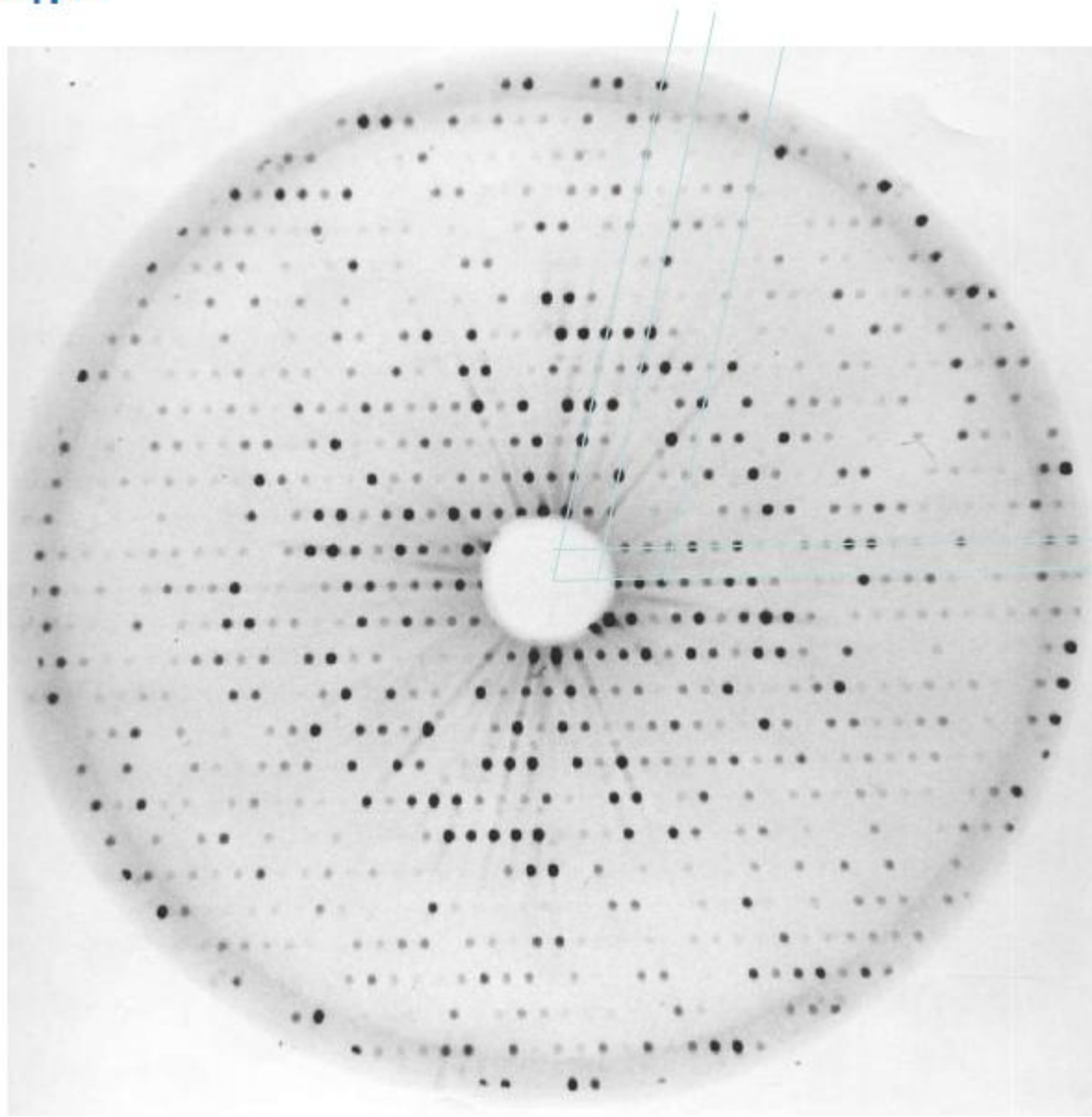
h) $[-2\ -1\ -1]$

Find out which one is wrong?

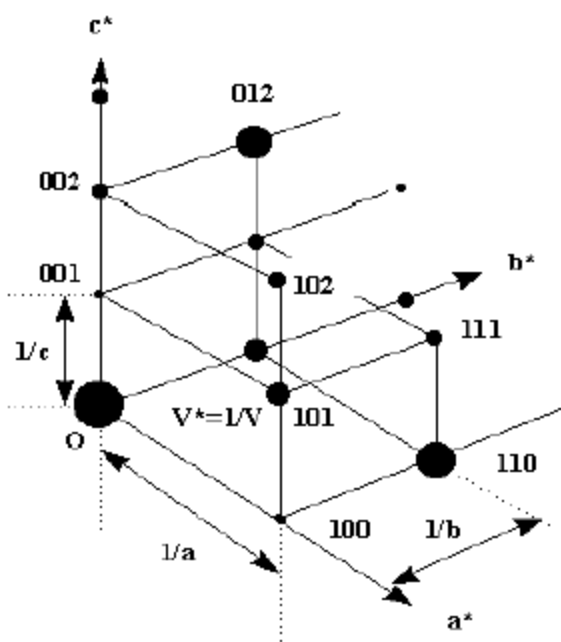


$D: [-1 \ 0 \ 1/3] = [-3 \ 0 \ 1]$

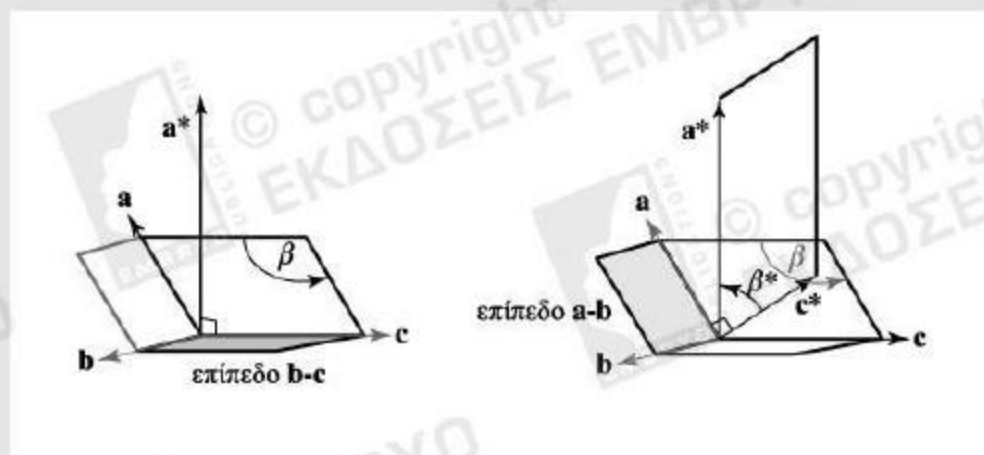
Στην εικόνα περίθλασης, οι ανακλάσεις σχηματίζουν ένα είδος πλέγματος, το **αντίστροφο πλέγμα**



Οι ανακλάσεις βρίσκονται πάνω σε ένα φανταστικό κρυσταλλικό πλέγμα (κορυφές) που αποτελεί το **αντίστροφο πλέγμα** (reciprocal lattice) που περιγράφεται με ένα σύστημα αξόνων με μοναδιαία διανύσματα a^*, b^*, c^* . Κάθε ανάκλαση χαρακτηρίζεται από τις συντεταγμένες της h, k, l σε αυτό το σύστημα αξόνων (όπου h, k, l είναι ακέραιοι αριθμοί). Για παράδειγμα η ανάκλαση 012 περιγράφεται από το διάνυσμα (ha^*, kb^*, lc^*) όπου $h=0, k=1, l=2$.

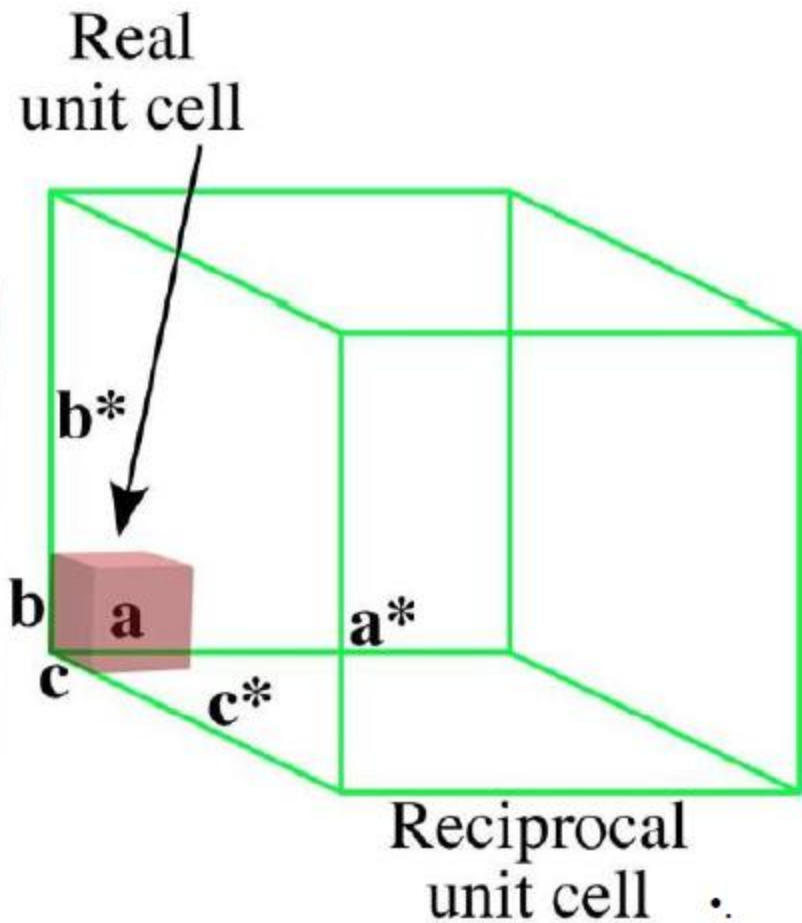
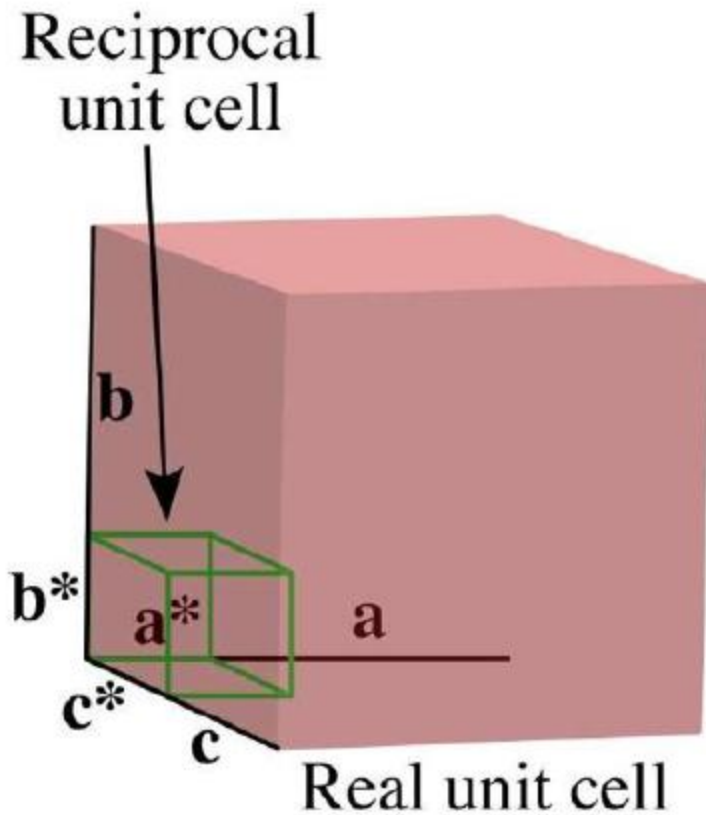


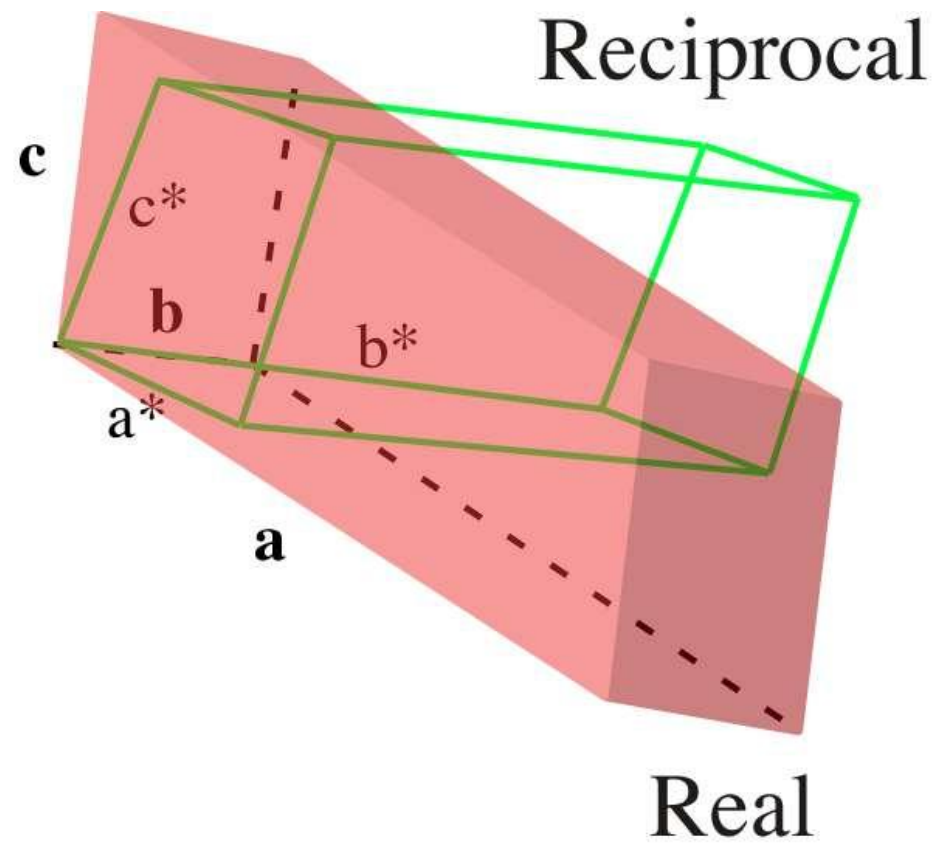
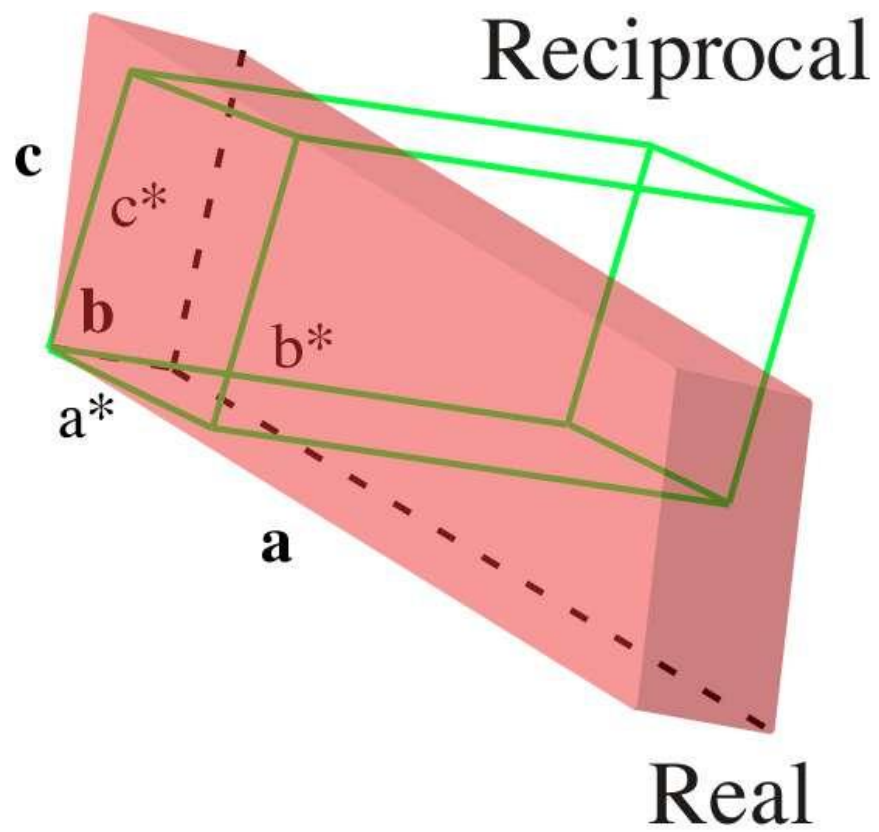
Κατασκευή της μοναδιαίας κυψελίδας του αντιστρόφου πλέγματος



Εικόνα 6.14 Κατασκευή μιας μοναδιαίας κυψελίδας του αντίστροφου χώρου (αντίστροφη μοναδιαία κυψελίδα) από μία μοναδιαία κυψελίδα του πραγματικού χώρου. Στο αριστερό μέρος περιγράφεται ο αντίστροφος άξονας a^* , ως το διάνυσμα σκέδασης που είναι κάθετο στο επίπεδο ανάκλασης $b-c$ της μοναδιαίας κυψελίδας στον πραγματικό χώρο (όπου ο b άξονας τείνει εκτός του επιπέδου της σελίδας). Ομοίως, ο άξονας c^* είναι κάθετος στο πραγματικό επίπεδο $a-b$. Η γωνία μεταξύ των a^* και c^* αξόνων είναι β^* (που είναι η παραπληρωματική της γωνίας β της πραγματικής μοναδιαίας κυψελίδας).

Στις περιπτώσεις που έχουμε κρυσταλλικό σύστημα όπου όλες τις γωνίες α, β, γ είναι ορθές, τότε και οι άξονες a^*, b^*, c^* αποτελούν ορθογώνιο σύστημα αξόνων (βλ. σχήμα παρακάτω). Επίσης ισχύει $a^* = 1/a, b^* = 1/b, c^* = 1/c$.





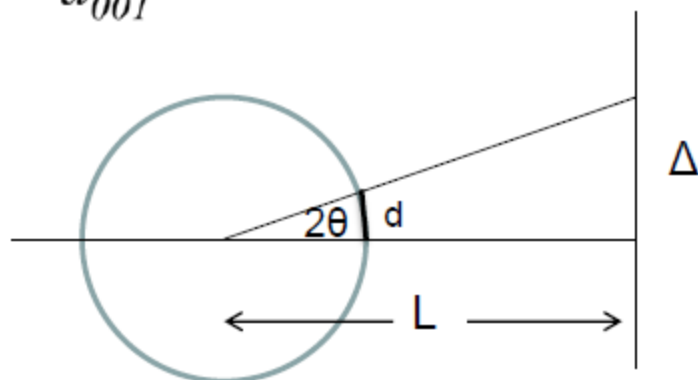
Από τις θέσεις των ανακλάσεων μπορούμε να προσδιορίσουμε τις διαστάσεις της κυψελίδας. Αυτό οφείλεται στο ότι οι αποστάσεις Δ ανάμεσα στις κηλίδες (που είναι ανάλογες με a^* , b^* , c^* αντίστοιχα) συσχετίζονται με τις ακμές a, b, c της μοναδιαίας κυψελίδας. Χρειάζεται να γνωρίζουμε ότι στη συγκεκριμένη περίπτωση, την απόσταση ανιχνευτή-κρυστάλλου L και το μήκος κύματος λ .

Χρησιμοποιώντας τριγωνομετρία, ισχύει

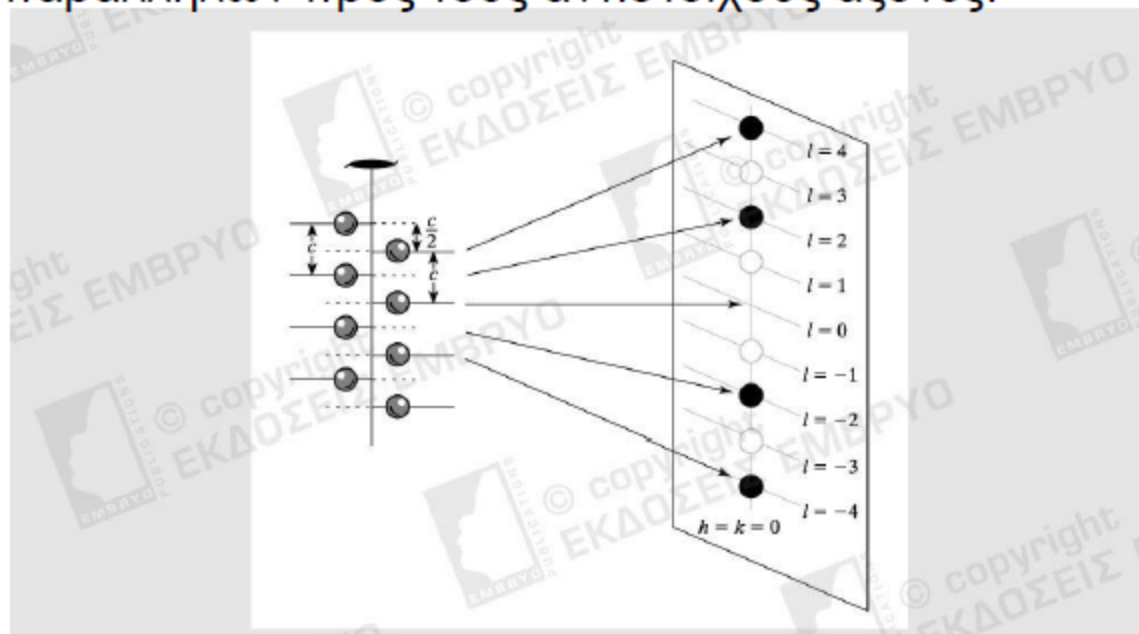
$$\frac{1/d_{hkl}}{1/\lambda} = \sin 2\theta = \sin(\tan^{-1}(\Delta/L))$$

Το d_{hkl} μας δίνει τις αντίστοιχες διαστάσεις a, b της μοναδιαίας κυψελίδας:

$$a = d_{100} \quad b = d_{010} \quad c = d_{001}$$



Οι εντάσεις των ανακλάσεων περιέχουν πληροφορίες για στοιχεία συμμετρίας στην μοναδιαία κυψελίδα. Αποδεικνύεται ότι η ύπαρξη **συστηματικών αποσβέσεων** (μηδενικών εντάσεων) για ανακλάσεις που βρίσκονται πάνω στους άξονες υποδεικνύει την ύπαρξη αξόνων ελίκωσης παράλληλων προς τους αντίστοιχους άξονες.



π.χ αν μόνο οι ζυγές ανακλάσεις ($2n$, $n=0,1,2,\dots$) έχουν **μη** μηδενική ένταση I , τότε υπάρχει άξονας ελίκωσης 2_1 παράλληλος με τον αντίστοιχο άξονα της μοναδιαίας κυψελίδας, αν μόνο οι ανακλάσεις με συντεταγμένη $4n$, $n=0,1,2,\dots$ είναι μη μηδενικές, τότε υπάρχει άξονας ελίκωσης 4_2

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι

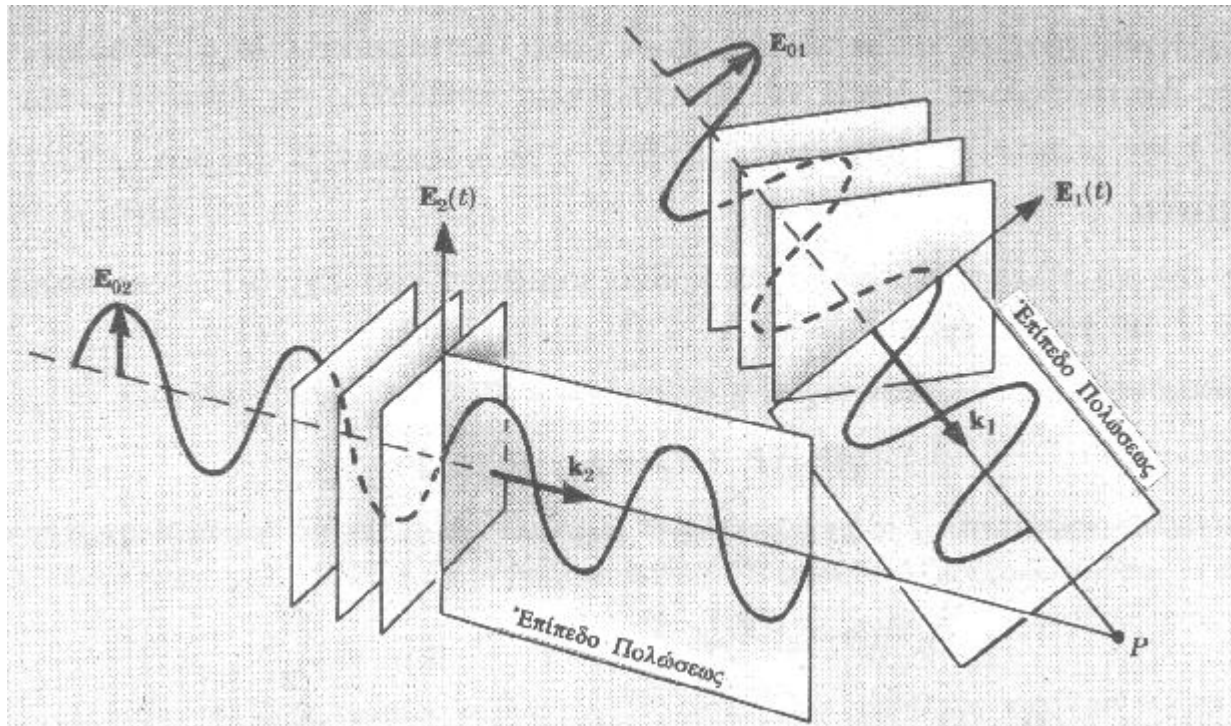
ΣΥΜΒΟΛΗ ΔΥΟ ΚΥΜΑΤΩΝ

Ας θεωρήσουμε δύο γραμμικά πολωμένα επίπεδα κύματα, που έχουν το ίδιο μήκος κύματος της μορφής

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{01} \cos(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varepsilon_1)$$

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{02} \cos(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varepsilon_2)$$

και τα οποία συναντιούνται στο σημείο P ($\mathbf{OP} = \mathbf{r}$). Υποθέτουμε ότι τα μεγέθη \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 , ω , ε_1 και ε_2 είναι όλα σταθερά. Τα κύματα αυτά μπορεί π.χ να προέρχονται από δύο πολύ μακρινές σημειακές πηγές. Το συνιστάμενο πεδίο θα είναι $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$



Στις οπτικές (και μεγαλύτερες $> 10^{14}$ Hz) συχνότητες τα μεγέθη \mathbf{E} , \mathbf{B} και \mathbf{S} μεταβάλλονται πολύ γρήγορα και είναι αδύνατο να μετρήσουμε στιγμιαίες τιμές του \mathbf{S} . Γι' αυτό προσδιορίζουμε τη μέση τιμή $\langle \mathbf{S} \rangle$ για ένα κατάλληλο χρονικό διάστημα. Το μέγεθος αυτό το ονομάζουμε ένταση ακτινοβολίας.

$$I \equiv \langle \mathbf{S} \rangle$$

Έστω Η/Μ κύμα στο κενό που περιγράφεται από τη σχέση: $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos(kx - \omega t)$

Το πεδίο \mathbf{B} έχει τη μορφή: $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 \cos(kx - \omega t)$ και συνεπώς

$$\mathbf{S} = c^2 \varepsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B} = c^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}_0 \times \mathbf{B}_0 \cos^2(kx - \omega t)$$

$$\text{Άρα } \langle \mathbf{S} \rangle = c^2 \varepsilon_0 |\mathbf{E} \times \mathbf{B}| \langle \cos^2(kx - \omega t) \rangle$$

Υπολογίζοντας τη μέση τιμή για ένα χρονικό διάστημα T βρίσκουμε:

$$\langle \cos^2(kx - \omega t) \rangle = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \cos^2(kx - \omega t') dt' = \frac{1}{2} - \frac{1}{4\omega T} \left\{ \sin[2kx - 2\omega(t+T)] - \sin 2(kx - \omega t) \right\}$$

Όταν (χρόνος μετρήσεως) $T \gg \tau$ (=περίοδος ταλάντωσης),

τότε $\omega T \gg 1$ και $\langle \cos^2(kx - \omega t) \rangle = 1/2$

Επομένως, αφού $E_0 = cB_0$,

$$I = \frac{c\varepsilon_0}{2} E_0^2 = c\varepsilon_0 \langle \mathbf{E}^2 \rangle$$

Το φως που χρησιμοποιούμε για τις μελέτες μας στο ερευνητικό πεδίο αυτού του ΠΜΣ αντιστοιχεί σε οπτικές και μεγαλύτερες συχνότητες, επομένως, τα πεδία ταλαντώνται με συχνότητες μεγαλύτερες από 10^{14} Hz.

Αυτό που μπορεί να μετρηθεί απευθείας και συνεπώς έχει πρακτικό ενδιαφέρον είναι η ένταση της ακτινοβολίας.

Αν παραλείψουμε ένα σταθερό παράγοντα, μπορούμε να θεωρήσουμε ως ένταση ακτινοβολίας τη μέση χρονική τιμή του ολικού πεδίου

$$I = \langle \mathbf{E}^2 \rangle$$

όπου $\mathbf{E}^2 \equiv \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}$ αλλά $\mathbf{E}^2 = (\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2) \cdot (\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2) = \mathbf{E}_1^2 + \mathbf{E}_2^2 + 2\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2$

Παίρνοντας τη μέση χρονική τιμή βρίσκουμε

$$I = I_1 + I_2 + I_{12}$$

όπου $I_1 = \langle \mathbf{E}_1^2 \rangle$, $I_2 = \langle \mathbf{E}_2^2 \rangle$ και $I_{12} = 2\langle \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2 \rangle$

Ο παράγοντας I_{12} ονομάζεται παράγοντας συμβολής, εξαιτίας αυτού η I δεν ισούται με το απλό άθροισμα των εντάσεων των συνιστωσών κυμάτων, δηλ. $I_1 + I_2$.

Η μέση χρονική τιμή μιας συνάρτησης $f(t)$ δίνεται από τη σχέση:

$$\langle f(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} f(t') dt'$$

Εδώ ο χρόνος μέτρησης T είναι πολύ μεγαλύτερος από την περίοδο ταλάντωσης τ των κυμάτων. Αν κάνουμε τους υπολογισμούς για τα δύο προηγούμενα επίπεδα κύματα ο παράγοντας συμβολής γράφεται

$$I_{12} = 2 \langle \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2 \rangle = \mathbf{E}_{01} \cdot \mathbf{E}_{02} \cos \delta$$

Όπου η **διαφορά φάσεως δ** δίνεται από τη σχέση:

$$\delta = (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}) + \varepsilon_1 - \varepsilon_2$$

Από τις δύο τελευταίες σχέσεις είναι φανερό ότι καθώς το \mathbf{r} μεταβάλλεται από σημείο σε σημείο στο χώρο (διαφορετικό σημείο συμβολής P), μεταβάλλονται και τα δ , I_{12} και I .

Διαφορά φάσης

$$\delta = (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}) + \varepsilon_1 - \varepsilon_2$$

✓ Η ύπαρξη του όρου $(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r})$ στη διαφορά φάσης οφείλεται στη διαφορά των οπτικών δρόμων που καλύπτουν τα κύματα, καθώς διαδίδονται από τα σημεία της πηγής προς το P.

✓ Η διαφορά $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ οφείλεται σε μια αρχική διαφορά φάσης δύο διαφορετικών σημειακών πηγών, και αν είναι σταθερή, όπως υποθέσαμε, λέμε ότι οι δύο πηγές είναι σύμφωνες.

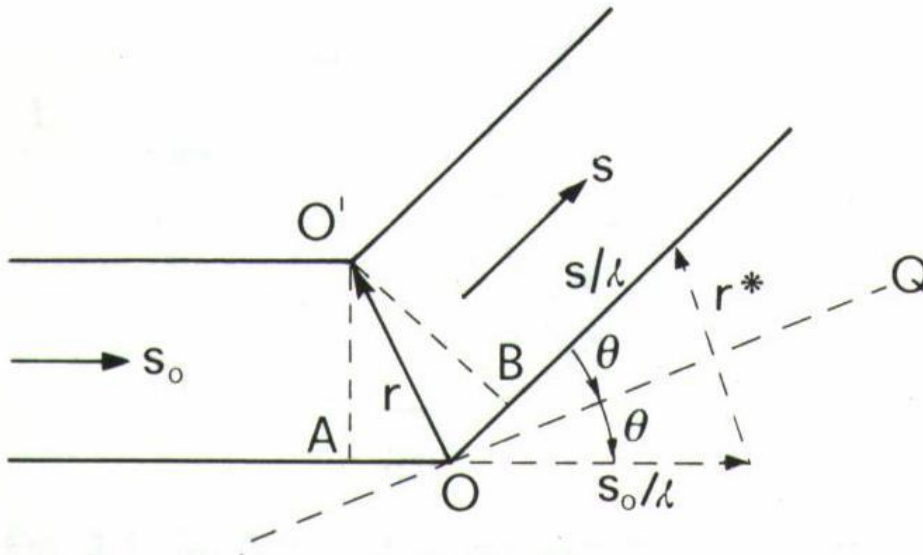
* Θα ακολουθήσουμε τον εξής κανόνα:

- αν τα επάλληλα κύματα είναι σύμφωνα, τότε, για να βρεθεί η ολική ένταση της ακτινοβολίας, τα ηλεκτρικά πεδία πρέπει να προστεθούν και το αποτέλεσμα να υψωθεί στο τετράγωνο (coherent - σκέδαση Thomson).

- αν τα κύματα δεν είναι σύμφωνα, τότε τα πεδία των κυμάτων είναι ουσιαστικά ανεξάρτητα και για να βρεθεί η ολική ένταση της ακτινοβολίας, αρκεί να προσθέτουμε απευθείας τις εντάσεις των κυμάτων (incoherent σκέδαση Compton = noise)

ΣΥΜΒΟΛΗ ΣΚΕΔΑΖΟΜΕΝΩΝ ΚΥΜΑΤΩΝ

(από σημειακούς σκεδαστές)



\mathbf{s}_0, \mathbf{s} : Μοναδιαία διανύσματα στην κατεύθυνση της προσπίπτουσας και της σκεδασζόμενης δέσμης

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{s}_0 (2\pi/\lambda) \quad \mathbf{k} = \mathbf{s} (2\pi/\lambda)$$

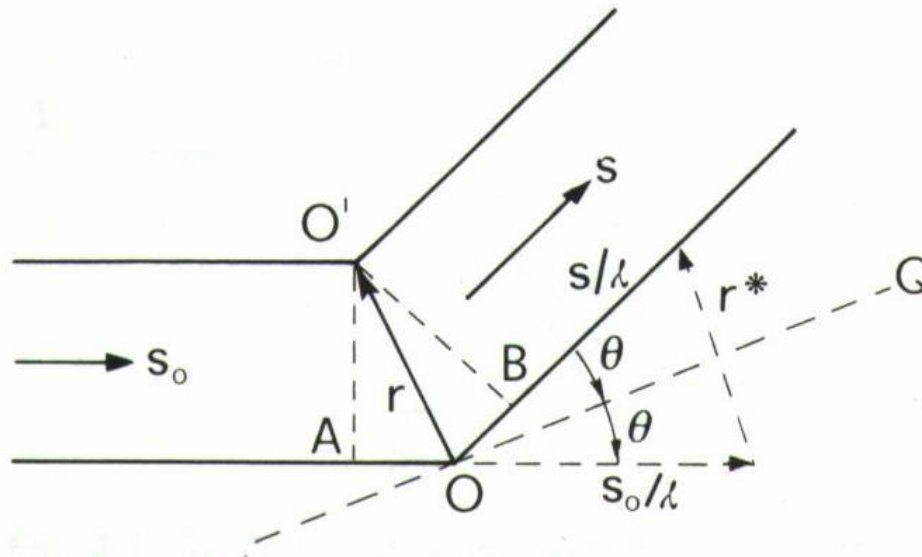
Η διαφορά φάσης μεταξύ των κυμάτων που σκεδάζονται από το O και το O' στην κατεύθυνση \mathbf{s} θα είναι:

$$\delta = (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r} = \frac{2\pi}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r} = 2\pi \mathbf{d}^* \cdot \mathbf{r} = 2\pi \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}$$

όπου: $\mathbf{H} = \mathbf{d}^* = \lambda^{-1}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)/(2\pi)$ *διάνυσμα σκεδάσεως*

ΣΥΜΒΟΛΗ ΣΚΕΔΑΖΟΜΕΝΩΝ ΚΥΜΑΤΩΝ

(από σημειακούς σκεδαστές)



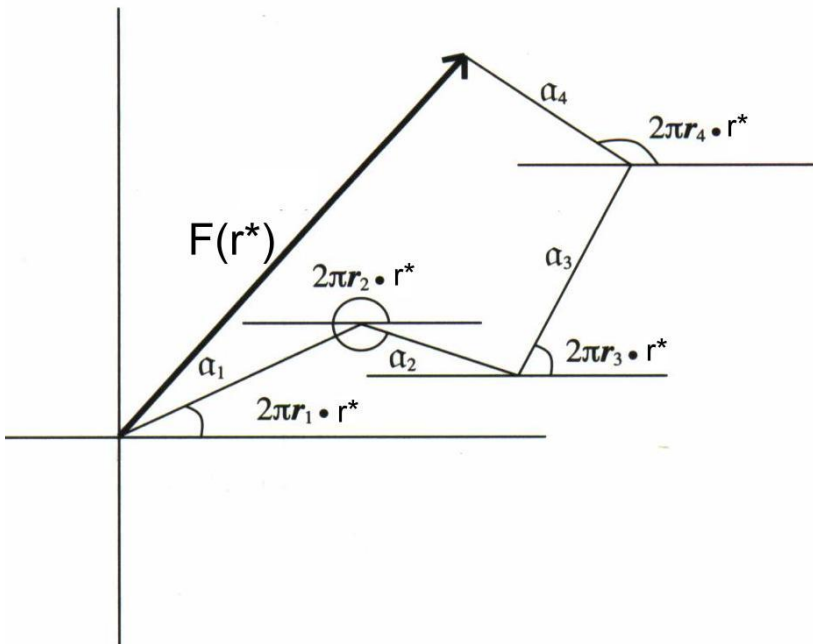
$$|\mathbf{H}| = d^* = 2 \sin\theta / \lambda$$

2θ : Η γωνία που σχηματίζει η προσπίπτουσα δέσμη με την διεύθυνση παρατήρησης

Εάν σκεδαζόμενο κύμα από O : Πλάτος A_0 , φάση θ
τότε από O' : $A_0 \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r})$

N σημειακοί σκεδαστές

στις θέσεις \mathbf{r}_j ($j = 1, \dots, N$) ως προς την επιλεγμένη αρχή και A_j το πλάτος σκεδαζομένου κύματος από τον j -σκεδαστή στην διεύθυνση $\mathbf{H} = \mathbf{d}^* = \lambda^{-1}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)$



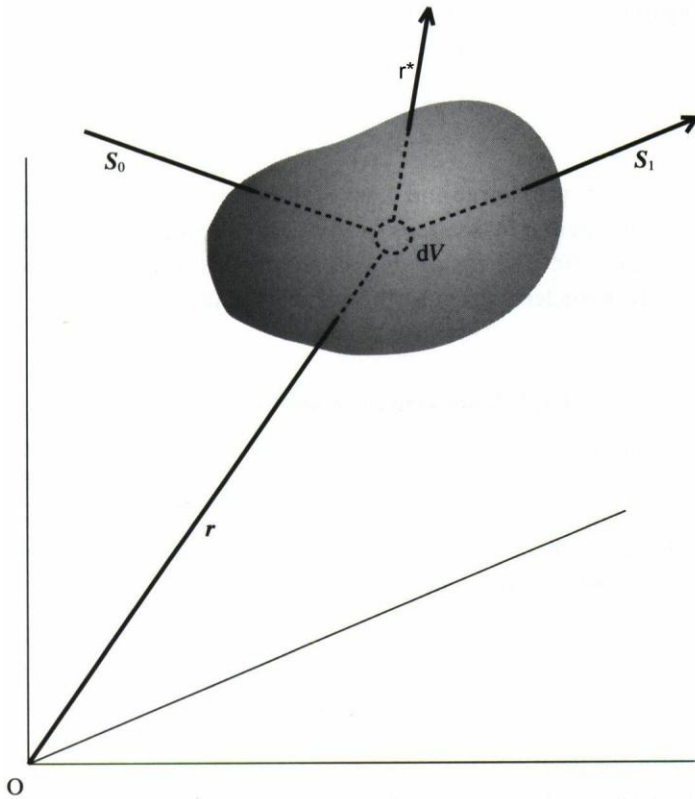
Το συνολικό σκεδαζόμενο κύμα στην διεύθυνση \mathbf{H} , θα δίνεται ως:

$$F(\mathbf{H}) = \sum_{j=1}^N A_j \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j)$$

Η ένταση της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας στην διεύθυνση \mathbf{r}^* θα είναι:

$$I(\mathbf{H}) = |F(\mathbf{H})|^2$$

Σκέδαση από συνεχή κατανομή σκεδαστικής ύλης



κατανομή πυκνότητας $\rho(\mathbf{r}) \rightarrow$
στον στοιχειώδη όγκο dV
 $\rho(\mathbf{r})dV$ στοιχ. σκεδαστ.
το σκεδαζόμενο κύμα:
 $\rho(\mathbf{r}) dV \exp (2\pi i \mathbf{r}^* \cdot \mathbf{r})$

Το συνολικό σκεδαζόμενο κύμα στην διεύθυνση \mathbf{r}^* , θα δίνεται τότε ως:

$$F(\mathbf{H}) = \int_V \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}) dV$$

$$F(\mathbf{H}) = \text{F.T.} [\rho(\mathbf{r})]$$

Σκέδαση από ελεύθερο ηλεκτρόνιο - Σκέδαση Thomson

$$I_{2\theta} = I_0 \frac{e^4}{m^2 r^2 c^4} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$$

Όπου: e και m , φορτίο και μάζα ηλεκτρονίου, c ταχύτητα φωτός

I_0 ένταση μη πολωμένης προσπίπτουσας δέσμης

$I_{2\theta}$ ένταση σκεδαζόμενης ακτινοβολίας στη διεύθυνση 2θ ανά μονάδα στερεάς γωνίας

$$P = (1 + \cos^2 2\theta) / 2$$

Παράγοντας πόλωσης

✗ Νετρόνια

✗ Πρωτόνια $(e/m)^2 1837^2$ μικρότερος των ηλεκτρονίων

Σύμφωνη σκεδαζόμενη ακτινοβολία

$$\frac{I}{I_{eTh}} = f^2$$

f → Παράγοντας Σκέδασης

Σκέδαση από άτομα

$\psi_1(\mathbf{r}), \dots, \psi_Z(\mathbf{r})$: κυματοσυναρτήσεις Z ατομικών ηλεκτρονίων
 $\rho_{ej} d\nu = |\psi_j(\mathbf{r})|^2 d\nu$: πιθανότητα να βρίσκεται το j ηλεκτρόνιο στον όγκο $d\nu$

Αν κάθε συνάρτηση $\psi_j(\mathbf{r})$ θεωρείται ανεξάρτητη από τις άλλες τότε:

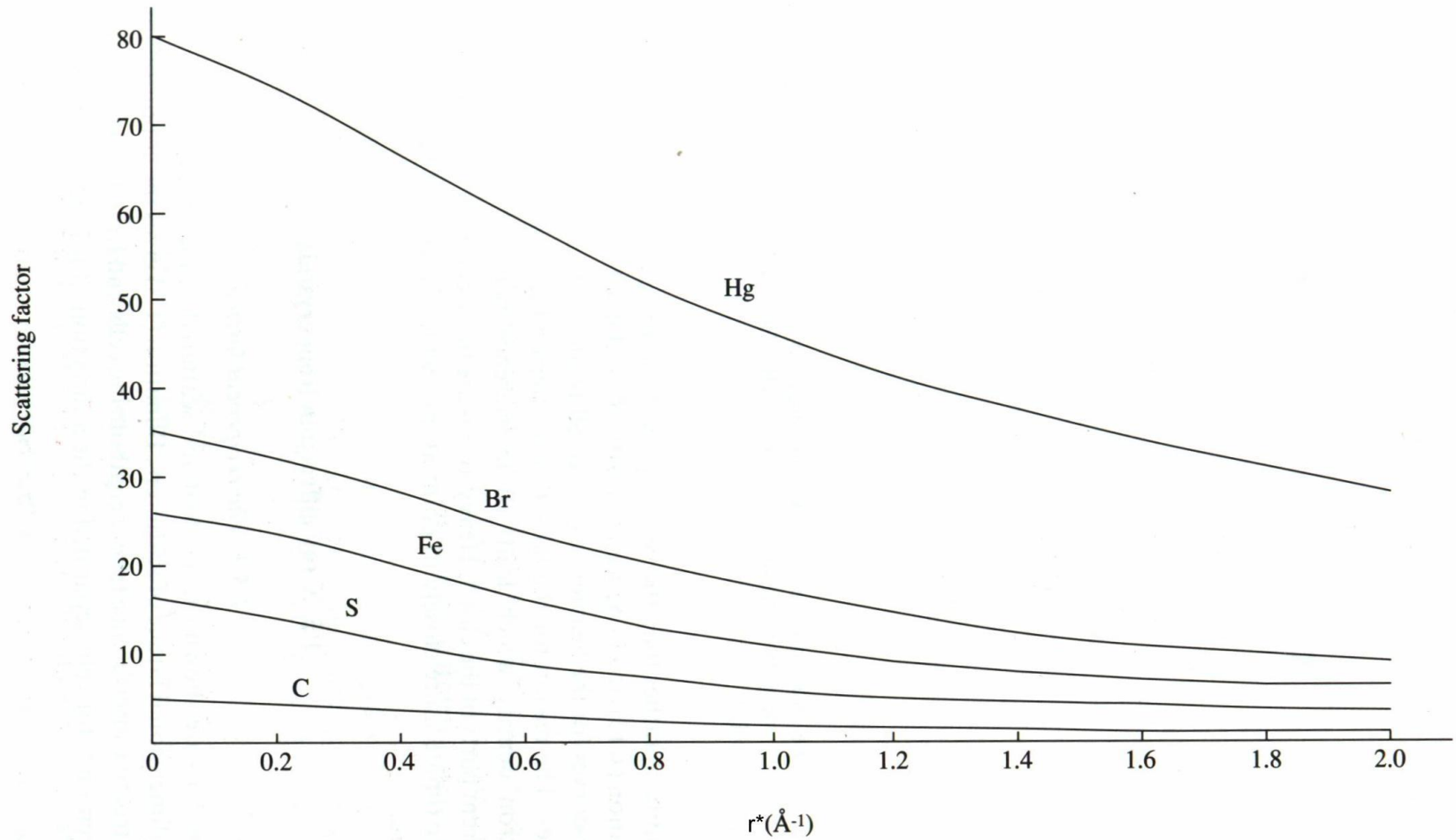
$$\rho_a(\mathbf{r}) d\nu = \left(\sum_{j=1}^Z \rho_{ej} \right) d\nu \quad \text{Πιθανότητα ένα } e^- \text{ να βρίσκεται στον όγκο } d\nu$$

Ατομικός παράγοντας Σκέδασης

Υπόθεση σφαιρικής συμμετρίας

$$f_a(\mathbf{H}) = \sum_{j=1}^Z f_{ej}$$

Ατομικοί παράγοντες σκέδασης συναρτήσει του $H = r^*$



Σκέδαση από μόριο ή μοναδιαία κυψελίδα

$$\rho_M(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \rho_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$$

$\rho_M(\mathbf{r})$: ηλεκτρονική πυκνότητα ενός προσεγγιστικού προτύπου του μορίου - συνάθροιση σφαιρικών ελεύθερων ατόμων που τοποθετούνται στη γεωμετρία του μορίου

$$\begin{aligned} F_M(\mathbf{H}) &= \int_S \sum_{j=1}^N \rho_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{j=1}^N \int_S \rho_j(\mathbf{R}_j) \exp[2\pi i \mathbf{H} \cdot (\mathbf{r}_j + \mathbf{R}_j)] d\mathbf{r} \\ &= \sum_{j=1}^N f_j(\mathbf{H}) \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j) \end{aligned}$$

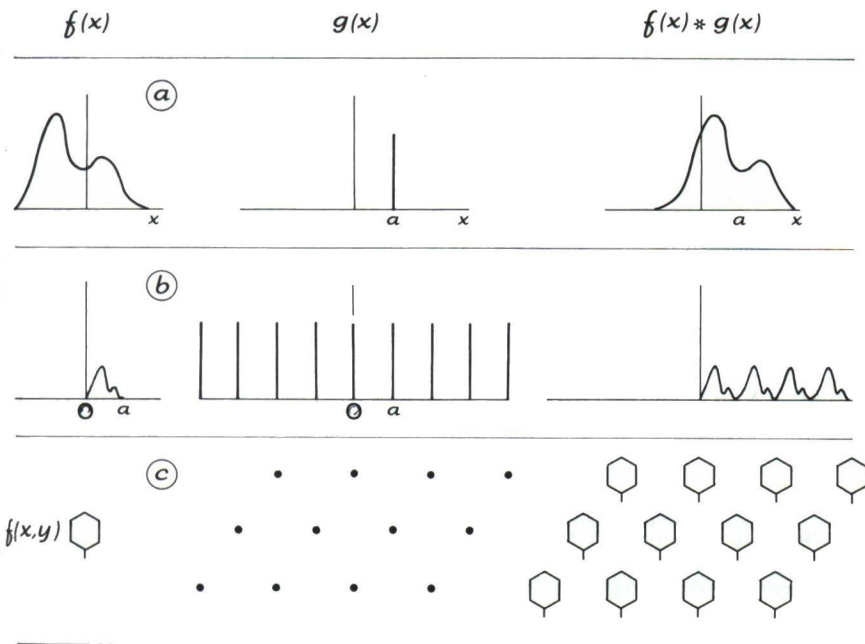
Περίθλαση από κρύσταλλο

$$L(\mathbf{r}) = \sum_{u,v,w=-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{u,v,w})$$

Όπου: δ-συνάρτηση Dirac

και $\mathbf{r}_{u,v,w} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$ (u, v, w ακέραιοι)

ένα γενικό διάνυσμα του πλέγματος



Η συνάρτηση που δίνει την ηλεκτρονική πυκνότητα για όλον τον κρύσταλλο

$$\rho_{\text{κρ.}}(\mathbf{r}) = \rho_M(\mathbf{r}) \otimes L(\mathbf{r})$$

Συνέλιξη

Σκεδαζόμενο κύμα από όλον τον κρύσταλλο στην διεύθυνση \mathbf{H}

$$F(\mathbf{H}) = FT[\rho_M(\mathbf{r})] \cdot FT[L(\mathbf{r})]$$

Ο ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΧΩΡΟΣ

$$FT[L(\mathbf{r})] = FT\left[\sum_{u,v,w=-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{u,v,w})\right] = \frac{1}{V} L(\mathbf{r}^*) = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r}^* - \mathbf{H})$$

Ο FT ενός πλέγματος στον ορθό χώρο \rightarrow Πλέγμα στον αντίστροφο χώρο Fourier

Αντίστροφος χώρος

$V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \wedge \mathbf{c}$ όγκος της μοναδιαίας κυψελίδας

$$\mathbf{a}^* = \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} / V, \quad \mathbf{b}^* = \mathbf{c} \wedge \mathbf{a} / V, \quad \mathbf{c}^* = \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} / V$$

$$\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b} = 0 \quad \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c} = 1$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}^* = h$$

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}^* = k$$

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{r}^* = l$$

$$\mathbf{r}^*_{\mathbf{H}} = \mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$$

ένα γενικό διάνυσμα του *αντίστροφου χώρου*, ο οποίος ορίζεται από τα διανύσματα \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* , και είναι κάθετο στην οικογένεια των πλεγματικών επιπέδων (hkl)

ΠΑΡΑΓΟΝΤΑΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

$$F(\mathbf{r}^*) = FT[\rho_M(\mathbf{r})] \cdot FT[L(\mathbf{r})] = F_M(\mathbf{r}^*) \cdot \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r}^* - \mathbf{H})$$

Ο κρύσταλλος, εμφανίζει περιοδικότητα στη διάταξη των δομικών μονάδων του, με αποτέλεσμα να παρατηρείται μη-μηδενικό πλάτος για το σκεδαζόμενο σε αυτόν κύμα μόνο όταν το \mathbf{r}^* ταυτίζεται με ένα σημείο του αντίστροφου πλέγματος δηλαδή:

$$\mathbf{r}^* = \mathbf{H}$$

Για την περίθλαση της ακτινοβολίας από κρύσταλλο, η συνάρτηση $F(\mathbf{H})$ ονομάζεται *παράγοντας δομής* με διανυσματικό δείκτη \mathbf{H} (ή δεικτών h, k, l)

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j)$$

Π.Θ.

όπου N είναι ο αριθμός των ατόμων στη μοναδιαία κυψελίδα

Παράγοντας δομής \leftarrow FT \rightarrow Συνάρτηση Ηλεκτρονικής πυκνότητας

$$F_{\mathbf{H}} = |F_{\mathbf{H}}| \exp(i\varphi_{\mathbf{H}})$$

$\varphi_{\mathbf{H}}$: φάση του παράγοντα δομής $F_{\mathbf{H}}$

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{+\infty} |F_{\mathbf{H}}| \exp[-2\pi i(hx + ky + lz)]$$

όπου x, y, z , είναι οι κλασματικές συντεταγμένες του σημείου που ορίζεται από το διάνυσμα \mathbf{r} . Οι ατομικές θέσεις θα αντιστοιχούν στα μέγιστα της $\rho(\mathbf{r})$.

ΣΥΝΘΕΣΗ FOURIER \rightarrow «*Μαθηματικοί φακοί*» για την
εστίαση των ακτίνων-x i



ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙ

Αλληλεπίδραση Η/Μ ακτινοβολίας - Ύλης

Πόλωση Η/Μ ακτινοβολίας μέσα στο υλικό → διαχωρισμό φορτίων μέσα στο υλικό → εμφανίζεται δίπολο που δονείται με την συχνότητα κύματος

Τα e των κρυστάλλων που δέχονται τις ακτίνες- x συμπεριφέρονται σαν διηλεκτρικά γι' αυτά τα μικρά μήκη κύματος.

Παραλείπουμε τις πλεγματικές ανωμαλίες. Τα e δονούνται με $y = y_0 \exp(i\omega t)$

Η πολωσιμότητα υπολογίζεται από την εξίσωση κίνησης:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{eE}{m} = \frac{eE_0}{m} \exp(i\omega t) \Rightarrow y = \frac{-eE}{m\omega^2} + c$$

Η πόλωση α είναι η διπολική ροπή ανά μονάδα πεδίου: $\alpha = ey/E = -$

$\frac{e^2}{m\omega^2}$
Γνωρίζουμε ότι ο δείκτης διάθλασης: $n \sim 1 + \alpha N/\epsilon_0$ (N αρ. e ανά μονάδα όγκου)

$$n^2 = 1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m \omega^2} = 1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m 4\pi^2 \nu^2} = 1 - \frac{\nu_p^2}{\nu^2}$$

Δείκτης διάθλασης για κάθε διηλεκτρικό όταν η πόλωση οφείλεται σε «ελεύθερα» e^-

Η ν_p είναι τυπική για κάθε διηλεκτρικό. Για μέταλλα αντιστοιχεί σε συχνότητα **υπεριώδους ακτινοβολίας**.



Σκέδαση νετρονίων

Νετρόνιο: Αδρόνιο – βαρυόνιο, spin $\frac{1}{2}$

Τα πειράματα περίθλασης νετρονίων (n-diffraction) απαιτούν υψηλές ροές που παράγονται στους σύγχρονους αντιδραστήρες.

Εκμεταλλευόμαστε: Υψηλές εντάσεις, χαμηλού μήκους κύματος ($\lambda < 1\text{\AA}$)

Αλληλεπίδραση νετρονίων – ατόμων

Συνίσταται: - στην αλληλεπίδραση νετρονίου – πυρήνα (αποκλειστική για Μη Μαγνητικά υλικά)
- και στην αλληλεπίδραση της μαγνητικής ροπής που συνδέεται με το spin του νετρονίου με τη μαγνητική ροπή του ατόμου (άτομα με ασυμπλήρωτες τις εξωτερικές στοιβάδες ηλεκτρονίων – Μαγνητικά υλικά)

Η αλληλεπίδραση των νετρονίων με την ύλη είναι ασθενέστερη συγκριτικά με αυτήν των ακτίνων-x και των ηλεκτρονίων. Για το λόγο αυτό η μέτρηση εντάσεων σκεδαζομένων νετρονίων απαιτεί **μεγάλη ροή νετρονίων και κρυστάλλους μεγέθους αρκετών mm.**



Σύμφωνες πηγές

Η απλούστερη κατάσταση που οδηγεί σε συμβολή παρουσιάζεται, όταν έχουμε δύο απaráλλαχτες σημειακές πηγές σε διαφορετικές θέσεις και η καθεμία εκπέμπει αρμονικά οδεύοντα κύματα της ίδιας συχνότητας σ' ένα ανοιχτό ομογενές μέσο. Αν κάθε πηγή έχει ακριβώς ορισμένη συχνότητα (και όχι μια κύρια συχνότητα και πεπερασμένο εύρος ζώνης συχνοτήτων), η σχετική φάση των δύο πηγών (η διαφορά μεταξύ των σταθερών φάσης τους) δεν αλλάζει με τον χρόνο. Οι δύο πηγές αυτές λέγονται σχετικά σύμφωνες ή απλώς **σύμφωνες**. (Ακόμη κι αν έχουν διαφορετικές συχνότητες, αυτές είναι «σύμφωνες», αν καθεμία είναι μονοχρωματική, αφού η σχετική τους φάση είναι πάντα πλήρως ορισμένη.) Αν κάθε πηγή έχει την ίδια κύρια συχνότητα με ένα πεπερασμένο εύρος ζώνης $\Delta\nu$, τότε, αν οι πηγές είναι «ανεξάρτητες», η σχετική τους φάση θα παραμένει σταθερή μόνο για χρονικά διαστήματα της τάξης του $(\Delta\nu)^{-1}$. Από την άλλη μεριά, δύο πηγές μπορεί να «αναγκάζονται» να έχουν σταθερή διαφορά φάσης μεταξύ τους, επειδή διεγείρονται από κοινή διεγείρουσα δύναμη. Σε αυτήν την περίπτωση, αν και η σταθερά φάσης κάθε πηγής μετατοπίζεται ανεξέλεγκτα κατά μία ποσότητα της τάξης του 2π σε χρόνο $(\Delta\nu)^{-1}$, όπου $\Delta\nu$ το εύρος ζώνης της κοινής διεγείρουσας δύναμης, η σχετική φάση θα παραμένει σταθερή. Τότε οι πηγές λέγονται σύμφωνες, μολονότι δεν είναι μονοχρωματικές.

Γι' αυτό χρησιμοποιούμε σχισμές στα παραδείγματα μας. Εάν αντικαταστήσουμε τις σχισμές με δύο όμοιες αλλά ανεξάρτητες πηγές φωτός, όπως π.χ. δύο κοινούς λαμπτήρες πυρακτώσεως, η διαφορά φάσης μεταξύ των κυμάτων που εκπέμπονται από αυτούς θα μεταβάλλεται ταχέως και τυχαία. Αυτό συμβαίνει επειδή το φως εκπέμπεται από τεράστιο πλήθος ατόμων ευρισκομένων στα πυρακτωμένα σύρματα. Τα άτομα αυτά δρουν τυχαία και ανεξάρτητα σε πολύ βραχεία χρονικά διαστήματα (της τάξης των nanoseconds) με αποτέλεσμα, σε κάθε σημείο της οθόνης-ανιχνευτή, η συμβολή των κυμάτων από τις δύο πηγές να μεταβάλλεται ταχέως και τυχαία από πλήρως ενισχυτική σε πλήρως αναιρετική. Το ανθρώπινο μάτι (και οι περισσότεροι οπτικοί ανιχνευτές) δεν μπορούν να παρακολουθήσουν τέτοιες αλλαγές και επομένως δεν είναι δυνατόν να παρατηρηθεί πρότυπο συμβολής. Η «οθόνη» θα φαίνεται σαν είναι ομοιόμορφα «φωτισμένη».

Το laser διαφέρει από τις κοινές πηγές φωτός εξαιτίας του ότι τα άτομα εκπέμπουν φως «συνεργαζόμενα»... Το φως του laser είναι περίπου μονοχρωματικό, εκπέμπεται σε λεπτές ακτίνες με «λίγο άπλωμα» και μπορεί να εστιαστεί σε ένα «πλάτος» το οποίο ταιριάζει με το μήκος κύματος του



Σκέδαση Compton

Όροι *ελαστικής σκέδασης* μεταξύ φωτονίου και ελεύθερου ηλεκτρονίου

$$\Delta\lambda (\text{\AA}) = 0.024 (1 - \cos 2\theta)$$

$\Delta\lambda$ δεν εξαρτάται από το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας

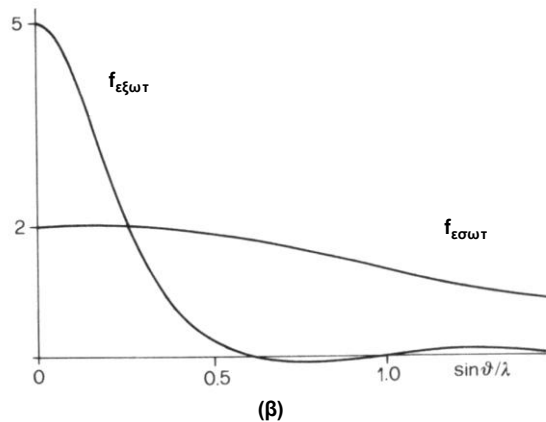
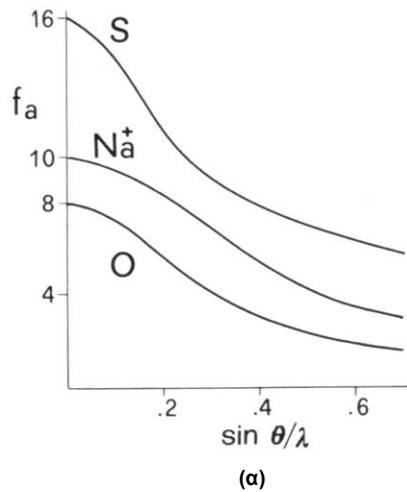
Μέγιστη τιμή ($\Delta\lambda = 0.048$) για $2\theta = \pi$ (οπισθοσκέδαση)

$\Delta\lambda = 0$ για $2\theta = 0$

Ασύμφωνη σκεδαζόμενη ακτινοβολία

Όχι φαινόμενο συμβολής

Ατομικός παράγοντας Σκέδασης



- για τα «ελαφρότερα» άτομα υπολογίζεται μέσω της μεθόδου Hartree–Fock
- για τα «βαρύτερα» μέσω της προσέγγισης Thomas–Fermi

Σχήμα 1.2: (α) Ατομικοί παράγοντες σκέδασης για τα S, Na^+ , O. (β) Παράγοντες σκέδασης για τα εσωτερικά και εξωτερικά ηλεκτρόνια του ατόμου του Na.

Θερμική κίνηση των ατόμων – Παράγοντας θερμικής ταλάντωσης

Οι θερμικές ταλαντώσεις επηρεάζουν τη συνάρτηση της ηλεκτρονικής πυκνότητας για κάθε άτομο και συνεπώς και τη σκεδαστική τους ικανότητα

$$f_{\text{at}}(\mathbf{r}^*) = f_a(\mathbf{r}^*) q(\mathbf{r}^*)$$

όπου $q(\mathbf{r}^*) = \int_{S'} \rho(\mathbf{r}') \exp(2\pi i \mathbf{r}^* \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}'$ (Παράγοντας Debye-Waller)

Υπόθεση ισοτροπίας (η θερμική κίνηση του ατόμου παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία και συνεπώς μπορεί να περιγραφεί από μια συνάρτηση του Gauss σε οποιοδήποτε σύστημα αναφοράς)

$$\rho(\mathbf{r}') = \rho(r') = (2\pi)^{-1/2} U^{-1/2} \exp[-(r'^2/2U)]$$

όπου: r' σε \AA , $U = \langle r'^2 \rangle$ είναι η μέση τιμή του τετραγώνου της μετατόπισης του ατόμου από τη θέση ισορροπίας του.

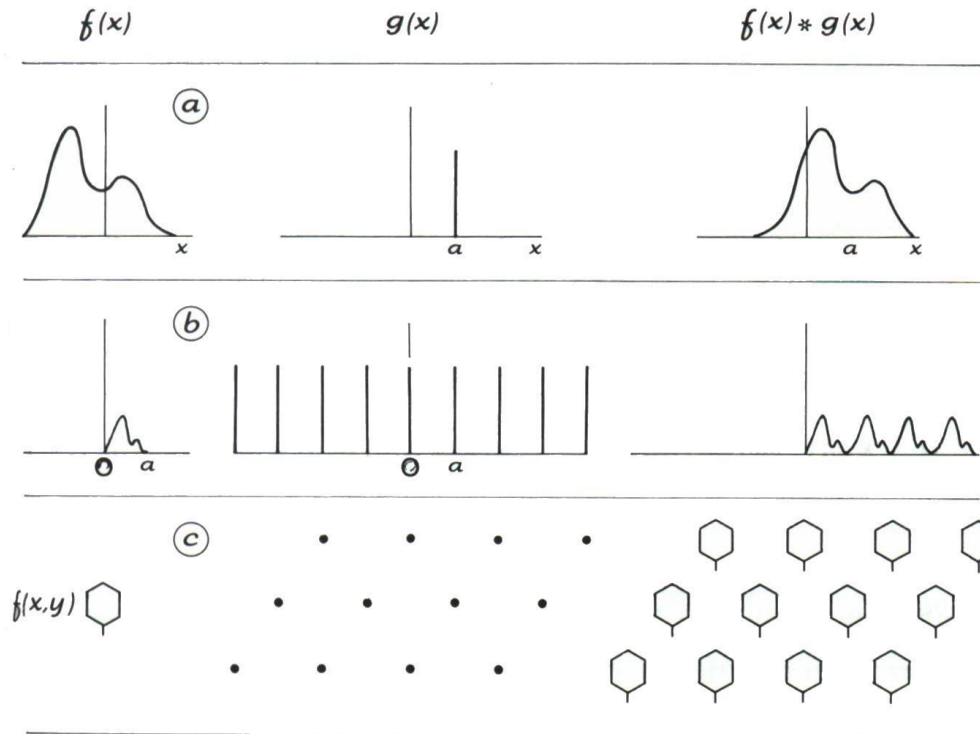
$$q(\mathbf{r}^*) = \exp(-2\pi^2 U r^{*2}) = \exp(-8\pi^2 U \sin^2\theta/\lambda) = \exp(-B \sin^2\theta/\lambda^2)$$

όπου $B = 8\pi^2 U$ (\AA^2) γνωστός ως *ατομικός παράγοντας θερμοκρασίας*.





Η πράξη της συνέλιξης



$$C(\mathbf{u}) = \rho(\mathbf{r}) \otimes g(\mathbf{r}) = \int_S \rho(\mathbf{r})g(\mathbf{u} - \mathbf{r})d\mathbf{r}$$

$$FT [\rho(\mathbf{r}) \otimes g(\mathbf{r})] = FT[\rho(\mathbf{r})] \cdot FT[g(\mathbf{r})]$$

$$P(\mathbf{u}) = \rho(\mathbf{r}) \otimes \rho(-\mathbf{r}) = \int_S \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{u} + \mathbf{r})d\mathbf{r} \xleftrightarrow{FT} FT[P(\mathbf{u})] = [A(\mathbf{r}^*) + iB(\mathbf{r}^*)][A(\mathbf{r}^*) - iB(\mathbf{r}^*)] = |F(\mathbf{r}^*)|^2$$

Παράγοντας θερμοκρασίας

Η θερμική διαταραχή των ατόμων εμφανίζεται στον παράγοντα δομής, αν ο παράγοντας σκέδασης f_j αντικατασταθεί, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις:

$$f_j = f_{0j} \exp(-B \sin^2 \theta / \lambda^2) \quad \text{Ισοτροπικός}$$

$$f_j = f_{0j} \exp(-8\pi^2 U_j \sin^2 \theta / \lambda^2) \quad \text{Ανισοτροπικός}$$

Όπου f_{0j} ο παράγοντας σκέδασης του j -οστού ατόμου όταν αυτό βρίσκεται σε ηρεμία.

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_{j=1}^N f_{0j} \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j - B \sin^2 \theta / \lambda^2)$$

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_{j=1}^N f_{0j} \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j - 8\pi^2 U_j \sin^2 \theta / \lambda^2)$$

